



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Gas de bosones en una serie finita de
capas delgadas penetrables

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

VIRIDIANA EVHERT BARRAGÁN VIDAL

DIRECTOR DE TESIS:

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ



2012

Hoja de datos del jurado

1. Datos del alumno

Barragán

Vidal

Viridiana Evhert

26437854

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

302182921

2. Datos del tutor

Dr. Francisco Javier

Sevilla

Pérez

3. Datos del sinodal 1

Dr. Luis Felipe

del Castillo

Dávila

4. Datos del sinodal 2

Dra. Marcela Dolores

Grether

González

5. Datos del sinodal 3

Dr. Miguel Ángel

Solís

Atala

6. Datos del sinodal 4

Dra. Andrea Luisa

Aburto

Espina

7. Datos de la tesis

Gas de bosones en una serie finita de capas delgadas penetrables

94 p.

2012

DEDICATORIA

En memoria a Gloria Barragán y Esperanza Bolivar.

En memoria a M. Somali y Mme. Sophie.

A mis padres Argelia Vidal y Jorge Barragán por creer en mi.

A mi hermano Israel Barragán por su apoyo incondicional.

AGRADECIMIENTOS

Quiero aprovechar para agradecer a la UNAM por haber sido parte de mi formación académica, al Departamento de Física de la Facultad de Ciencias que me asignó a tan distinguido Jurado, al Instituto de Física por haberme aceptado como estudiante Asociado y así mismo disponer de sus instalaciones y servicios durante la elaboración de esta tesis.

Agradezco a mis asesores el Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez y al Dr. Miguel Ángel Solís Atala, por su amistad, interés y disposición al dirigir esta tesis.

A los Drs. Marcela Grether, Andrea Aburto y Luis Felipe del Castillo que aceptaron formar parte del jurado, sugiriéndome comentarios que han enriquecido la presentación final de este trabajo.

Por último quiero agradecer al CONACyT por el apoyo económico otorgado a través de beca de tesis de licenciatura del proyecto No. 104017.

Índice general

0.1. Resumen	5
1. Introducción	8
2. Generalidades: Gas ideal de bosones en 3D y el Potencial Kronig Penney	13
2.1. Gas ideal de bosones	14
2.1.1. Calor específico	19
2.2. Potencial de Kronig-Penney para el caso infinito	22
3. Espectro de energías de partículas en una caja impenetrable entre \mathcal{M} potenciales delta	30
3.1. Potencial de confinamiento con uno y dos potenciales δ en una caja de potencial impenetrable	31
3.1.1. Para una delta	31
3.1.2. Para dos deltas	35
3.2. Partícula constreñida en una caja de potencial impenetrable con \mathcal{M} potenciales delta equidistantes	43
4. Termodinámica de un gas ideal de bosones en estructuras de capas del tipo $L_x \times L_y \times L_z \times$ con $L_{x,y} \rightarrow \infty$	53
4.1. Bosones entre capas delgadas	53
4.2. Bosones entre planos permeables dentro de una caja	54
4.2.1. Energía Interna	59

4.2.2. Calor Específico	62
4.3. Resultados	67
5. Conclusiones	82

Índice de figuras

2.1. Potencial de Kronig-Penney periódico.	23
2.2. Calor específico de un gas ideal de bosones en 3D y 2D	28
2.3. Calor específico en unidades de Nk_B como función de la temperatura adimensional T/T_0 de un gas de bosones ideales, confinados en la dirección z por un potencial periódico de Kronig-Penney.	29
3.1. Energías para uno y dos planos dada una P	34
3.2. Niveles de energía para un plano con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$	35
3.3. Potencial de Kronig-Penney con dos planos	36
3.4. Niveles de energía para dos planos con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$	43
3.5. Niveles de energía para 10 planos con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$	52
4.1. Sistema periódico en 3D de planos que representan deltas de Dirac. En las direcciones x y y son bosones que se mueven libremente y en la dirección z interactúan con las deltas de Dirac	55
4.2. T/T_0 vs L/λ_0 , figura tomada de [35].	69
4.3. Diagrama de flujo computacional.	72
4.4. C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P	73
4.5. C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 10 planos de impermeabilidad variable P	74

4.6.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 100 planos de impermeabilidad variable P	75
4.7.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 1000 planos de impermeabilidad variable P	76
4.8.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P	77
4.9.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y 100 planos de impermeabilidad variable P	78
4.10.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y 1000 planos de impermeabilidad variable P	79
4.11.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (10)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P	80
4.12.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (10)\lambda_0$ y 10 planos de impermeabilidad variable P	81
5.1.	C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$, intensidad del plano permeable $P = 10$ y número de planos permeables $\mathcal{M} = 1, 10, 100, 1000, \infty$	85

0.1. Resumen

El objetivo de esta tesis es estudiar la existencia o no de la condensación de Bose-Einstein (CBE) a una temperatura finita $T_0 > 0$, y aportar criterios para distinguirla, en un sistema de N bosones que no interactúan entre ellos en una caja impenetrable de anchura finita en la dirección z e infinita en las direcciones x y y . Adicionalmente, los bosones están confinados por \mathcal{M} planos de impermeabilidad variable en la dirección z , espaciados entre ellos con una longitud a . Para ello nos auxiliamos del comportamiento del calor específico a volumen constante C_V como función de la temperatura T del sistema, que como sabemos para el caso tridimensional, manifiesta la CBE como una discontinuidad en su derivada en T_0 , mientras que en el caso bidimensional no existe CBE a $T_0 \neq 0$.

La estructura periódica en la dirección z se simula como una caja unidimensional finita, que contiene un número finito de planos impermeables (deltas de Dirac) igualmente espaciados y todos de la misma intensidad, la cual podemos variar. En esta estructura multicapas semi-infinita los bosones pueden moverse libremente en las direcciones x y y .

Para obtener las propiedades termodinámicas y en particular el C_V , además de considerar el espectro de energía de la partícula libre en las direcciones x y y , se calcula el espectro de energías de una partícula dentro de la caja unidimensional con un número finito de planos impermeables en la dirección z . Dicho cálculo se plantea como una generalización del caso de uno y dos planos permeables. Para una partícula en una caja con una delta, se resuelve directamente la ecuación de Schrödinger. Para el caso con dos deltas se utilizó la matriz de transferencia misma que fue utilizada para el caso general de un número finito de planos permeables, obteniéndose una relación implícita para la energía como función del vector de onda que caracteriza el estado de la partícula, mismo que depende del número de planos impermeables \mathcal{M} , su intensidad P , así como de la separación a entre ellos. Dicha relación se resuelve numéricamente para el espectro de energías en la dirección z , para lo que fue nece-

sario implementar un programa en lenguaje C.

El espectro de energía total de las partículas se introduce en la expresión del gran potencial y de allí calcular C_V . Para este último es necesario calcular previamente la energía interna, el potencial químico y su derivada como función de la temperatura. De los resultados obtenidos del C_V/Nk_B vs T/T_0 (donde T_0 es la temperatura crítica en un gas ideal de bosones 3D en el límite termodinámico L.T.) para distintos valores de los parámetros: $P = 0, 1, 10, 100, 1000$, $a/\lambda_0 = 0.1, 1, 10$ (donde λ_0 es la longitud de onda térmica evaluada en la temperatura crítica de un gas ideal de bosones 3D en el L.T.) y $\mathcal{M} = 1, 10, 100, 1000$, se reportan las siguientes conclusiones: $\mathcal{M} = 1$, $a/\lambda_0 = 0.1$ es suficiente para observar efectos conspicuos.

Respecto del caso $\mathcal{M} = 0$, se observa que al aumentar la intensidad de la delta hay nuevos máximos en los que ocurre una transición de dos a tres dimensiones que puede relacionarse con la estructura del espectro de energía, puesto que para temperaturas bajas el sistema se comporta como en dos dimensiones ya que sólo contribuyen las energías en la direcciones x y y , mientras que en la dirección z sólo contribuye el nivel de mínima energía y al aumentar la temperatura los otros niveles en la dirección z comienzan a contribuir causando la transición a tres dimensiones. Si aumentamos el número de deltas, los máximos se agudizan aumentando el valor de C_V , se corre a la temperatura característica para ciertos valores de P tendiendo al caso en tres dimensiones. Si se aumenta el tamaño del sistema ya sea aumentando a o el número de deltas de tal forma que nos acercamos al límite termodinámico los máximos se convierten en cúspides exactamente en $T = T_0$.

Sintetizando, tenemos que al introducir planos en una caja semi-infinita los efectos son más notorios cuando la distancia interplanar es pequeña y aparece un nuevo máximo si $P > 0$ y tiende a desaparecer para valores grandes de P . Si aumentamos el número de deltas hay una transición de dimensión y los máximos más lejanos se van recorriendo a temperaturas mayores conforme aumentamos P saturándose en $T \simeq 100 T_0$.

Para el sistema estudiado en esta tesis no hay una condensación Bose-Einstein como se demuestra en el Capítulo 4, pero si se observa un máximo que puede interpretarse como una aproximación hacia la condensación, esto sólo si se hace tender la dirección $z \rightarrow \infty$ de tal forma que se retoma el caso en tres dimensiones ya estudiado en la literatura. Si la dirección z es muy chica a tal grado que sólo contribuye el nivel de mínima energía podemos observar que el máximo tiende a desaparecer dando lugar a la curva de C_V/Nk_B vs T/T_0 que caracteriza el caso estudiado en dos dimensiones.

Capítulo 1

Introducción

El desarrollo de las nano estructuras [1]-[6], el descubrimiento de la superconductividad de alta T_c [7], la superfluidez de películas delgadas de helio cuatro (^4He) [8] y la obtención en el laboratorio de condensados Bose-Einstein [10]-[11] en potenciales ópticos periódicos [9], nos ha motivado a estudiar un gas de Bose sin interacción dentro de estructuras periódicas finitas.

En 1924 Satyendra Nath Bose con ayuda de Albert Einstein publica un artículo sobre fotones y sus propiedades estadísticas [12]. Bose describe las reglas para determinar si dos fotones deberían considerarse idénticos o diferentes, lo que conlleva a la estadística de Bose. Einstein aplicó dichas reglas a los átomos de un gas [13] y con ello se encuentra que a muy bajas temperaturas, la mayoría de los átomos se condensan en el mismo estado cuántico de mínima energía [14]. Este estado nuevo de agregación de la materia, llamado condensado de Bose-Einstein, ocurre en sistemas de partículas llamadas bosones, que tienen espín total un múltiplo entero de \hbar [15] y que cumplen con que cualquier número de ellas pueden ocupar alguno de sus niveles de energía [16]. Otra de las propiedades de dicho fenómeno físico es que su índice de refracción es muy grande, lo que implica que la luz se mueve a una velocidad de cientos de metros por segundo [17]. El condensado de Bose-Einstein fue predicho en 1925 por Albert Einstein y desde entonces este fenómeno cuántico, sin análogo clásico, ha sido objeto de estudio para muchas áreas de la Física.

En particular dos fenómenos, en principio sin relación entre si, muestran extraordinaria similitud con la condensación de Bose-Einstein [18]-[22], la superfluidez y la superconductividad.

Dado el descubrimiento de la superfluidez del helio cuatro (^4He) líquido por Kapitza en 1938 [23], ese mismo año, London [18]-[22] propone que este fenómeno es una representación de un condensado Bose-Einstein. No fue sino hasta principios de los años 90's que se sugiere la CBE en excitones de semiconductores [24]-[27], aun así tomó 70 años a partir de su predicción teórica para generar experimentalmente un gas de bosones con posibilidad de condensarse [11]. Esto fue hecho en la Universidad de Boulder Colorado USA para un gas diluido de átomos de Rubidio (^{87}Rb) [28], confinados en el espacio por un campo magnético inhomogéneo, dicho experimento fue reproducido con átomos de litio (^7Li) [29] polarizado en la Universidad de Rice en Houston Texas y en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) [30] con átomos de sodio (^{23}Na).

La manera en que se obtiene el condensado es mediante un previo enfriamiento de un gas via LASER, atrapándolos con campos magnéticos inhomogéneos y superenfriándolo evaporativamente [11], dicha obtención lleva al estudio teórico de gases bosónicos sujetos a un potencial externo, el cual se puede aproximar por un potencial armónico[11].

La condensación Bose-Einstein y la superconductividad parecen ser dos fenómenos distantes ya que el primero se da entre bosones y el otro se origina entre fermiones, sin embargo estas pueden relacionarse si se considera que las interacciones entre fermiones propicia la formación de bosones compuestos que pueden condensarse y manifestarse como superconductividad [18]-[22].

En el año de 1911 la superconductividad fué descubierta por K. Onnes al enfriar mercurio (Hg) por debajo de 4.3K, pero no fue sino hasta 1986 que se reporta el primer

cuprato superconductor de alta $T_c \simeq 30\text{K}$ (LaBaCuO) por Bednorz y Müller [31] y en 1987 ganan el premio Nobel de Física por su contribución en el descubrimiento de superconductividad. El trabajo de Bednorz y Müller da la pauta a acceder a superconductores con temperaturas críticas superiores a la temperatura del nitrógeno líquido a presión ambiente. En el mismo año C. Y. Chu [32] y sus colaboradores corroboran el hallazgo y lo extienden a superconductores cuya temperatura de transición superconductora es de 92K en el material $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, dada su estructura cristalina con simetría planar se considera es la causante de la alta temperatura de transición superconductora [33]. Es por ello que en los últimos años se ha replanteado la teoría de superconductividad para sistemas con una, dos y dimensiones intermedias [34].

Los avances tecnológicos en el confinamiento de partículas permite tener sistemas en una, dos o dimensiones cercanas a cero [1]-[2] a tal grado que los conocidos puntos cuánticos [5] (electrones confinados a estructuras que pueden considerarse como puntos), se comportan como átomos naturales, los cuales pueden llevar al diseño de nuevos dispositivos electrónicos y ópticos [4]-[6]. Así es de interés estudiar la posibilidad de CBE en tales sistemas.

Los fenómenos mencionados anteriormente se destacan por el confinamiento de partículas ya sean fermiónicas o bosónicas, cuyas propiedades dependen altamente del potencial confinante.

En el Capítulo 2 describiremos detalladamente los resultados ya conocidos sobre un gas ideal de bosones en tres dimensiones en una caja impenetrable de tamaño $L_x \times L_y \times L_z$ partiendo de la gran función de partición \mathcal{Z} y obteniendo las expresiones para el número de partículas N en el sistema, la temperatura crítica T_0 , la energía interna U y el calor específico C_V en función de la temperatura. Experimentalmente es posible estudiar sistemas que en ciertas aproximaciones pueden considerarse como ideales (sistemas muy diluidos o tales que la interacción puede ser manipulada con campos magnéticos [11]) tal situación disminuyen los efectos físicos que puedan interferir en los resultados predichos para el caso ideal. Estos estudios deben de corroborar

lo predicho por la teoría para así poder formular una ley, es por ello que atacamos problemas de partículas no interactuantes donde se puede entender la naturaleza del fenómeno. Se comenta también sobre la imposibilidad de la transición en la condensación Bose-Einstein (CBE) del correspondiente sistema ideal en 2 dimensiones.

Con el propósito de incluir los efectos de un potencial confinante y periódico en la dirección z , describimos el potencial de Kronig-Penney obteniendo la relación de dispersión que nos da las energías que pueden tener las partículas para determinado vector de onda k . Considerando el límite de la barrera de potencial infinitesimalmente angosta, $b \rightarrow 0$, e infinitamente alta, $V_0 \rightarrow \infty$, de tal manera que $V_0 b = cte$, este potencial se convierte en un arreglo periódico de deltas de Dirac, también conocida como “peine de Dirac”, donde la intensidad de dichas deltas están asociadas al valor del producto de $V_0 b$. Finalmente describimos las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones libres en dos direcciones y confinados en la dirección restante por el potencial de Kronig-Penney, discutiendo brevemente sobre los resultados ya reportados en la literatura.

En el Capítulo 3 consideramos la finitud del sistema en una de las direcciones y hacemos el cálculo del espectro de energía cuando se consideran para uno y dos potenciales delta de Dirac. Con dos deltas introducimos el método de la matriz de transferencia, el cual nos permite generalizar nuestro cálculo a un número finito \mathcal{M} de potenciales delta de Dirac. Limitándonos explícitamente al espectro de energía en la dirección z , haciendo un breve análisis sobre el comportamiento de los niveles de energía para distintas intensidades de las barreras $P = 0, 1, 10, 100$, donde P es una cantidad adimensional que caracterizará la intensidad de los planos cuando calculamos el C_V en un sistema finito donde en la dirección z dichas barreras están presentes.

Consideremos también distintos número de planos $\mathcal{M} = 1, 2, 10$, observando que tenemos niveles fijos, esto es, que no dependen de los parámetros del sistema y otros que se van concentrando a estos cuando se aumenta la intensidad de la barreras, es decir, los niveles movibles dependen de P de tal manera que cuando se varía la

intensidad del plano, estos se van concentrando a los niveles fijos a tal grado que cuando hay un plano con intensidad muy grande, casi infinita, los niveles se degeneran al nivel de energía de una caja impenetrable de longitud a . El número de planos determina el número de niveles, de tal modo que se tienen $(\mathcal{M} + 1)$ niveles, agrupados en estructuras tipo bandas de energía como las que aparecen en el modelo de Kronig-Penney.

En el Capítulo 4 estudiamos la termodinámica de un gas ideal de bosones en estructuras del tipo $L_x \times L_y \times L_z$ con $L_{x,y} \rightarrow \infty$. En la dirección z se tienen planos permeables dentro de una caja de longitud $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$, los planos son generados por \mathcal{M} potenciales delta de intensidad P , donde una vez obtenidos los niveles de energía como se muestra en el Capítulo tres hacemos uso de ellos para calcular la fugacidad z (a la que llegamos partiendo de la expresión de número total de partículas dividida entre el volumen del sistema que es la densidad de número) que es empleada al hacer los cálculos del calor específico C_V obtenida al derivar la energía interna U con respecto a la temperatura a volumen constante. Para analizar los máximos que aparecen en el sistema, graficamos el calor específico vs la temperatura, variando, la intensidad de los planos P , la distancia entre planos a y el número de planos \mathcal{M} .

En el Capítulo 5 concluimos que al introducir planos permeables en un sistema como el estudiado por Pathria [35] en la dirección que considera finita, son notorios los efectos si la distancia interplanar es pequeña y aparece un nuevo máximo en C_V cuando $P > 0$ y tiende a desaparecer para P 's grandes. Por otra parte si aumentamos el número de deltas hay una transición de dimensión de modo que el máximos de Pathria en C_V se va recorriendo a temperaturas mayores conforme se aumenta P , saturándose a un valor determinado de la temperatura.

Capítulo 2

Generalidades: Gas ideal de bosones en 3D y el Potencial Kroning Penney

En este Capítulo se presentan varios resultados conocidos en la literatura y que sirven de base para el estudio en el presente trabajo. En la Sección 2.1 se presentan, de manera breve y general, las características más importantes (la temperatura crítica T_0 y el calor específico C_V como función de la temperatura) de un gas ideal de bosones en tres dimensiones. Se comenta también sobre la imposibilidad de la transición BEC en 2 dimensiones.

Con el propósito de incluir los efectos de un potencial confinante y periódico en la dirección z , en la sección (2.2) se presenta el cálculo del espectro de energía de una partícula en un potencial de tipo Kroning-Penney.

Como parte final de dicha sección, se discuten brevemente las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones libres en dos direcciones y confinados en la dirección restante. Aunque dichos resultados son bien conocidos [35], [36] y [37], lo reproducimos aquí por completez.

2.1. Gas ideal de bosones

La ocupación macroscópica y espontánea de partículas al estado de mínima energía (Condensación de Bose-Einstein), predicho por Einstein, fue considerada simplemente un mero ejercicio académico, hasta su realización experimental usando gases de átomos alcalinos bosónicos confinados en trampas óptico-magnéticas. Aún cuando para describir la situación experimental se debe considerar el potencial de confinamiento y la interacción entre partículas, el caso más simple discutido en detalle en varios libros sobre Mecánica Estadística, es el del gas ideal de Bose en una caja impenetrable, descrito brevemente a continuación.

Partiendo de la relación general para encontrar la gran función de partición tenemos:

$$\mathcal{Z} = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} z^{n_i} e^{-\beta \varepsilon_i n_i} \quad (2.1)$$

con $z = e^{\beta \mu}$ que denota la fugacidad, μ el potencial químico, $\beta = 1/k_B T$ y ε_i la energía del i -ésimo nivel de una partícula.

Introduciendo la información que el sistema está formado por bosones llegamos a la función de partición

$$\mathcal{Z} = \prod_i [1 - z e^{-\beta \varepsilon_i}]^{-1}. \quad (2.2)$$

Haciendo la conexión entre el formalismo estadístico del ensamble gran canónico y la termodinámica clásica podemos obtener el número de partículas en el sistema el cual es

$$N = z \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial z} \quad (2.3)$$

la cual usando la expresión (2.2) tenemos que

$$N = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1}. \quad (2.4)$$

El número total de partículas y la energía del sistema están dados por

$$N = \sum_i \langle n_i \rangle \quad y \quad E = \sum_i \varepsilon_i \langle n_i \rangle, \quad (2.5)$$

respectivamente, y encontramos que la energía del gas ideal de bosones es:

$$E = \sum_i \frac{\varepsilon_i}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1}, \quad (2.6)$$

donde hemos usado que

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon_i} - 1}. \quad (2.7)$$

Para una partícula libre en una caja de potencial impenetrable, la función de onda fuera de la caja se anula, es decir,

$$\psi = 0 \quad (2.8)$$

y dentro de la caja, el Hamiltoniano es

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (2.9)$$

donde el momento está dado por $p = (\hbar/2\pi)k$, con $k = 2\pi n/\lambda$ el vector de onda y n el vector unitario.

Entonces la ecuación de Schrödinger para el sistema es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (2.10)$$

que en una dimensión se escribe como

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - E\psi(x) = 0. \quad (2.11)$$

Resolviendo en cada dirección y aplicando las condiciones de frontera apropiadas tenemos la relación de dispersión siguiente:

$$\varepsilon = \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.12)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (2.13)$$

con

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z \quad (2.14)$$

y

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (2.15)$$

El número de estados con vector de onda que se encuentran en el primer octante dada la simetría esférica de (2.13), está dado por el volumen de la esfera de radio k

$$\Omega = \frac{1}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \frac{4}{3} \pi k^3 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3} \pi |k|^3. \quad (2.16)$$

Haciendo uso de la relación de dispersión (2.13), tenemos que

$$\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2} \quad (2.17)$$

$$= \frac{L^3}{6\pi^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{3/2} \quad (2.18)$$

entonces la densidad de estados de energía es:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d\Omega}{d\varepsilon} \quad (2.19)$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}. \quad (2.20)$$

En el límite termodinámico (L. T.) donde N y L tienden a infinito tal que $(N/L)^3 = cte$, la suma del número de partículas (2.4) se pueden remplazar por integrales, de tal manera que empleando (2.20) podemos escribir a (2.4) en términos de la densidad de estados de la siguiente forma:

$$N = N_0 + N_e \quad (2.21)$$

$$N = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \int_0^\infty \frac{\rho(\varepsilon)}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.22)$$

$$= \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (2.23)$$

donde hemos separado explícitamente el número de partículas en el estado base N_0 .

Haciendo el cambio de variable $x \equiv \beta\varepsilon$, $dx = \beta d\varepsilon$ y después de una serie de cálculos se llega a:

$$N = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} dx. \quad (2.24)$$

La función de Bose se define como

$$g_\sigma(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx \quad (2.25)$$

así, podemos escribir N en términos de la función de Bose

$$N = \frac{1}{z^{-1} - 1} + \frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(z). \quad (2.26)$$

La temperatura crítica T_0 se define como la temperatura para la cual el número total de partículas del sistema se encuentran en los estados excitados y el número de partículas en el estado base es $N_0 = 0$. Para una temperatura ligeramente menor, una porción considerable del total de partículas ocupan el estado base de tal forma que $\mu = 0$ y la fugacidad es $z = 1$, entonces

$$N = N_e = \frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T_0)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(1). \quad (2.27)$$

De tal modo que la temperatura crítica estará dada por

$$k_B T_0 = \left(\frac{N}{\frac{L^3}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \Gamma(3/2) g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} = \frac{(2\pi)^{4/3} \hbar^2 n^{2/3}}{[\Gamma(3/2) \zeta(3/2)]^{2/3} 2m} \simeq 3.31 \hbar^2 n^{2/3} / m \quad (2.28)$$

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

Procediendo de manera análoga en el caso de dos dimensiones, el número de partículas en el estado base a una temperatura crítica $T_0 > 0$, es cero y el potencial químico vale cero para toda temperatura T menor o igual T_0 . El número de partículas en los estados excitados esta dado por:

$$N = N_e(T_0) = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \int dk_x \int dk_y \frac{1}{e^{\beta_c(\varepsilon - \mu)} - 1} = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \frac{2\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{e^{\beta_c(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (2.29)$$

de modo que

$$\frac{N}{L^2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{2\pi m k_B T_0}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{dx}{e^x - 1} \quad (2.30)$$

como se ve la integral diverge y la única forma de que N/L^2 sea constante es que $k_B T_0 = 0$ entonces no hay $T_0 > 0$ y por ende no se presenta el condensado.

2.1.1. Calor específico

Para encontrar el calor específico a volumen constante necesitamos derivar la energía interna del sistema

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (2.31)$$

la energía interna para el gas ideal de bosones en 3D está dada por, ver pag.159 [39]

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

$$U = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (2.32)$$

con $\lambda = h/(2\pi m k_B T)^{1/2}$.

Para el caso en que $T > T_0 \Rightarrow N_0 = 0$, el calor específico es

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[(3/2) V \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (k_B T)^{5/2} g_{5/2}(z) \right] \quad (2.33)$$

$$= (3/2) V \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \left[(5/2) (k_B T)^{3/2} k_B g_{5/2}(z) + (k_B T)^{5/2} g_{3/2}(z) \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right]. \quad (2.34)$$

Para encontrar el término de la derivada de la fugacidad con respecto a T , consideremos la ecuación (2.27), partiendo de que el número total de partículas es constante y entonces no depende de la temperatura, así

$$N = N_0 + N_e, \quad \text{con} \quad N_0 = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial N}{\partial T} = 0 \quad (2.35)$$

por lo que

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial N}{\partial T} = V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{\partial}{\partial T} [(k_B T)^{3/2} g_{3/2}(z)] \\
&= V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \left[3/2 (k_B T)^{1/2} k_B g_{3/2}(z) + (k_B T)^{3/2} g_{1/2}(z) \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right] \quad (2.36)
\end{aligned}$$

de tal manera que

$$\frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} = \frac{(-1)(3/2)(k_B T)^{1/2} k_B g_{3/2}(z)}{(k_B T)^{3/2} g_{1/2}(z)} \quad (2.37)$$

entonces podemos escribir al calor específico como

$$C_V = (3/2)V \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \left[(5/2)(k_B T)^{3/2} k_B g_{5/2}(z) - (3/2)(k_B T)^{3/2} \frac{g_{3/2}^2(z)}{g_{1/2}(z)} k_B \right],$$

o equivalentemente como

$$\frac{C_V}{k_B} = (3/2)V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(z) \left[5/2 \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - (3/2) \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right], \quad (2.38)$$

y finalmente usando (2.26) con $N_0 = 0$

$$\frac{C_V}{N_e k_B} = 3/2 \left[5/2 \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - 3/2 \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right]. \quad (2.39)$$

Si consideramos un sistema en 3D el número de partículas cuando $N_0 = 0$ tenemos

$$N_e = N = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) = \frac{V}{\lambda_0^3} g_{3/2}(1), \quad (2.40)$$

donde el número de partículas N si depende de la temperatura crítica y la longitud de onda térmica en términos de la temperatura crítica está dada por $\lambda_0 = \frac{h}{(2m\pi k_B T_0)^{1/2}}$,

entonces

$$1 = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} \quad (2.41)$$

expresión de la cual podemos resolver para z .

Si $T \leq T_0$, como $\mu = 0$ entonces $z = 1$ y la energía interna está dada por

$$U = (3/2)k_B T g_{5/2}(1) \frac{V}{\lambda^3}. \quad (2.42)$$

El calor específico es

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left[(3/2)k_B T g_{5/2}(1) \frac{V}{\lambda^3} \right] \quad (2.43)$$

$$C_V = (3/2)g_{5/2}(1) \left[\frac{\partial}{\partial T} k_B T \frac{V}{\lambda^3} \right] \quad (2.44)$$

$$C_V = (3/2)g_{5/2}(1) \left[k_B \frac{V}{\lambda^3} + (3/2)k_B V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/2} \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right) \right] \quad (2.45)$$

$$C_V = (3/2)g_{5/2}(1)k_B \left[\frac{V}{\lambda^3} + (3/2)V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \quad (2.46)$$

$$C_V = (3/2)g_{5/2}(1)k_B \left[\frac{V}{\lambda^3} + (3/2)\frac{V}{\lambda^3} \right] \quad (2.47)$$

$$\frac{C_V}{Nk_B} = (15/4) \frac{V}{\lambda^3} \frac{g_{5/2}(1)}{\frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(1)} = (15/4) \left(\frac{\lambda_0}{\lambda} \right)^3 \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \quad (2.48)$$

entonces

$$\frac{C_V}{Nk_B} = (15/4) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}. \quad (2.49)$$

Como se muestra en la figura 2.2, en 3D (línea negra) la transición de fase es resaltada por una *cúspide* en $T = T_0$ en la curva del calor específico C_V vs temperatura T . La cúspide separa dos distintas dependencias de C_V/Nk_B en T : un crecimien-

to monótono del tipo de ley de potencias $(T/T_0)^{3/2}$ para valores de $T \leq T_0$, que alcanza el valor máximo $\frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \simeq 1.9257$ en $T = T_0$, donde $\zeta(z)$ es la función zeta de Riemann. Para $T \geq T_0$, C_V disminuye monótonamente hacia el valor clásico $C_V/Nk_B = 3/2$.

La cúspide en C_V es caracterizada por una discontinuidad en su derivada en T_c dada por la expresión $(\frac{3}{2})^3 [\zeta(3/2)]^2 g_{-1/2}(1) / [g_{1/2}(1)]^3 \simeq 3.66577$ donde $g_\sigma(z)$ es la función de Bose y $\lim_{z \rightarrow 1} g_{-1/2}(z) / [g_{1/2}(z)]^3 = \frac{1}{2\pi}$.

En el caso de 2D (línea roja) como se observa en la ecuación (2.30) la única forma de que N/L^2 sea constante es que $k_B T_0 = 0$, así para todos los valores $T > 0$ no hay condensado por la divergencia, es por ello que la curva de C_V en 2D tiene un crecimiento monótono no decreciente.

2.2. Potencial de Kronig-Penney para el caso infinito

La situación física más sencilla donde está involucrado un potencial periódico, es el de un electrón confinado en un sólido (por ejemplo en un metal), donde la estructura periódica de los átomos que forman el sólido proporciona un potencial externo periódico para el electrón [40].

Dado que nuestro interés es encontrar el espectro de energía para una partícula en un potencial periódico, consideremos en la dirección z el potencial de Kronig-Penney [37] y [38] con un periodo de $a + b$, como se muestra en la figura (2.1), donde el potencial vale cero en la región $0 < z < a$ y V_0 en la región $-b < z < 0$, el cual podemos escribir de la siguiente manera:

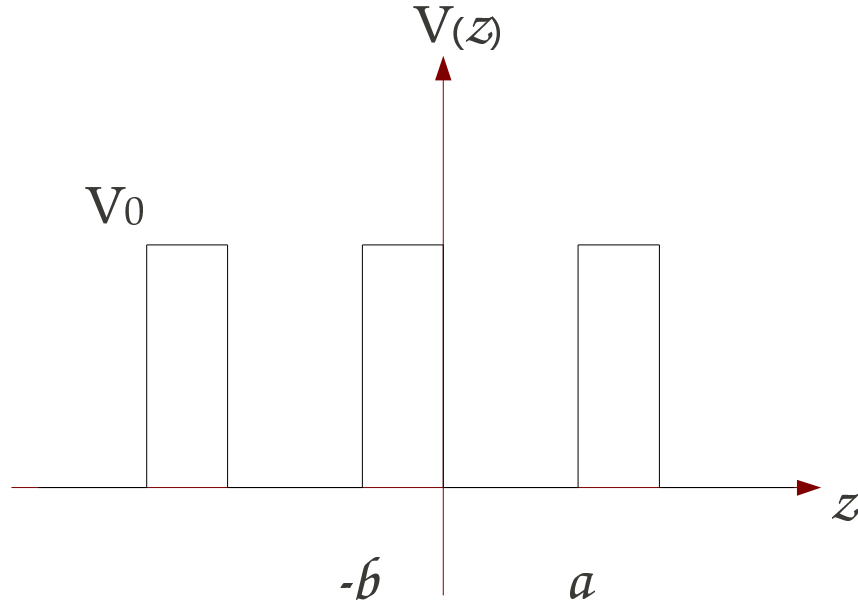


Figura 2.1: Potencial de Kronig-Penney periódico.

$$V(z) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta[z - (a + (n-1)(a+b))] \Theta[-z + n(a+b)] \quad (2.50)$$

donde V_0 es la altura de la barrera de potencial y Θ es la función de Heaviside. La función de onda ψ de un bosón que está sujeto al potencial de Kronig-Penney satisface la siguiente ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon \psi = 0 \quad \text{si} \quad 0 < z < a \quad (2.51)$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon - V_0) \psi = 0 \quad \text{si} \quad -b < z < 0. \quad (2.52)$$

Definimos las siguientes cantidades

$$\alpha^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \quad (2.53)$$

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \varepsilon). \quad (2.54)$$

La solución a las ecuaciones (2.51) y (2.52), está determinada por el teorema de Bloch [40], el cual establece que para el potencial periódico la ecuación de onda es de la forma

$$\psi(z) = e^{ikz}u_k(z), \quad (2.55)$$

donde $u_k(z)$ es una función periódica con el mismo periodo del potencial y k es el número de onda. Sustituyendo (2.55) en (2.51) y (2.52), obtenemos las siguientes ecuaciones diferenciales para $u_k(z)$

$$u'' + 2iku' + (\alpha^2 - k^2)u = 0 \quad 0 < z < a \quad (2.56)$$

$$u'' + 2iku' - (\beta^2 + k^2)u = 0 \quad -b < z < 0, \quad (2.57)$$

donde por simpleza de notación, hemos quitado la dependencia explícita de u en k y u' , u'' denotan la primera y segunda derivada en z respectivamente.

Para (2.56) y (2.57), al ser ecuaciones de segundo orden, proponemos soluciones de la forma

$$u = e^{-\gamma z} \quad \text{y} \quad u = e^{\gamma z}$$

que al sustituirse en (2.56) y (2.57) respectivamente, dan por solución general

$$u_1 = Ae^{i(\alpha-k)z} + Be^{-i(\alpha+k)z} \quad 0 < z < a \quad (2.58)$$

$$u_2 = Ce^{(\beta-ik)z} + De^{-(\beta+ik)z} \quad -b < z < 0. \quad (2.59)$$

siendo A , B , C y D constantes, que se determinan de las condiciones de frontera de la función de onda ψ , la cual debe de ser continua y con derivada continua. En $z = 0$,

son de la siguiente manera

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad y \quad \psi'_1(0) = \psi'_2(0) \quad (2.60)$$

y al emplear el teorema de Bloch, el cual impone la periodicidad de u como en su derivada, tenemos las siguientes condiciones a la frontera

$$u_1(a) = u_2(-b) \quad y \quad u'_1(a) = u'_2(-b). \quad (2.61)$$

De este modo al aplicar las condiciones de frontera tenemos

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

Este sistema de ecuaciones lineales homogéneas tienen solución distinta a la trivial si su determinante es cero

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(\alpha-k)a} & e^{-i(\alpha+k)a} & -e^{-(\beta-ik)b} & -e^{(\beta+ik)b} \\ i(\alpha-k)e^{i(\alpha-k)a} & -i(\alpha+k)e^{-i(\alpha+k)a} & -(\beta-ik)e^{-(\beta-ik)b} & (\beta+ik)e^{(\beta+ik)b} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.62)$$

Resolviendo, obtenemos la relación de dispersión, la cual nos dice sobre las energías que puede tener la partícula en determinada k

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos[(a+b)k]. \quad (2.63)$$

De la ecuación (2.63) podemos determinar las energías de las partículas ya sea cuando $\varepsilon < V_0$ o $\varepsilon > V_0$. Para $\varepsilon < V_0$, si tomamos el caso límite cuando $b \rightarrow 0$ y $V_0 \rightarrow \infty$ de tal manera que $V_0 b = cte$, estos potenciales se convierten en una serie de deltas de Dirac o también conocida como “peine de Dirac”, donde la intensidad de estas deltas están asociadas al valor del producto de $V_0 b$.

Entonces, si multiplicamos por ab/ab el primer término de la ecuación (2.63) y tomamos dicho límite tenemos que

$$\lim_{b \rightarrow 0} \frac{\sinh(\beta b)}{\beta b} = 1, \quad \lim_{b \rightarrow 0} \cosh(\beta b) = 1 \quad y \quad \lim_{b \rightarrow 0} (\beta^2 - \alpha^2) ab = \frac{2mV_0 ba}{\hbar^2} = P \quad (2.64)$$

entonces tenemos la siguiente expresión para la relación de dispersión para el potencial de Kronig- Penney con una delta por celda unitaria

$$\frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka). \quad (2.65)$$

Esta ecuación no tiene solución analítica para ε como función de k , pero la podemos resolver gráficamente donde la parte derecha de la ecuación esta implícitamente en términos de la energía y la parte izquierda tiene valores entre 1 y -1, de modo que dentro de este intervalo tenemos valores para αa .

Si graficamos la parte de la ecuación en términos de la energía contra αa tenemos dos regiones en la cual una es la parte prohibida y la otra corresponde a las bandas permitidas, además podemos observar que el ancho de banda incrementa conforme aumenta αa y P disminuye.

Si consideramos el caso en que $P \rightarrow \infty$ el ancho de banda que era continuo se discretiza de tal manera que tenemos niveles de energía debido a que no se presenta

tunelaje, dichos niveles de energía de los bosones toman los valores

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.66)$$

que corresponden a los de una partícula confinada en un pozo de potencial de ancho a y paredes infinitas, en este caso sólo hay soluciones si $\alpha a = n\pi$ ($n \in \mathbb{Z}$).

Como comentarios finales a este capítulo, quiero mencionar que en los estudios presentados en las referencias [41]-[42], se ha utilizado el modelo de Kronig-Penney para calcular las propiedades termodinámicas de un gas ideal de bosones en una estructura periódica (infinita) de capas. Las capas son modeladas por barras del tipo delta de Dirac. En ese caso, el espectro de energía corresponde a la energía de una partícula que es libre en las direcciones x y y , $\varepsilon_{k_x, k_y} = \hbar^2 k_{x,y}^2 / 2m$ y al dado por la relación de dispersión (2.63) en la dirección z . La existencia de una temperatura crítica distinta de cero en ese sistema es garantizada por la dependencia $g(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2}$ de la densidad de estados $g(\varepsilon)$ con la energía ε para valores bajos de esta [41].

En la figura (2.3) se reproduce el calor específico C_V/Nk_B como función de la temperatura en unidades de T_0 , siendo esta última la temperatura de un gas ideal de bosones libres en tres dimensiones. Como puede observarse en el panel de la izquierda para $a/\lambda_0 = 0.892$, cuando $a \approx \lambda_0$ la cúspide de la condensación Bose-Einstein del gas ideal libre (cúspide de la curva negra a rayas) ocurre a temperaturas menores que T_0 y se hace menos aguda cuando se aumenta P . Notése la aparición de un máximo a temperaturas mayores que T_0 , este máximo ha sido asociado con el máximo descrito en los trabajos de Pathria y colaboradores para un gas ideal de bosones en geometrías del tipo de película delgada [35]. Para valores de a mucho más pequeños que λ_0 los efectos del potencial periódico se manifiestan a temperaturas más altas como puede apreciarse en el panel derecho de la figura 2.3 para $a/\lambda_0 = 0.0892$. Los efectos de aumentar P son más notorios, respecto del caso anterior, pues aparece un mínimo cuya anchura crece al aumentarse P exhibiendo un comportamiento cuasi-bidimensional.

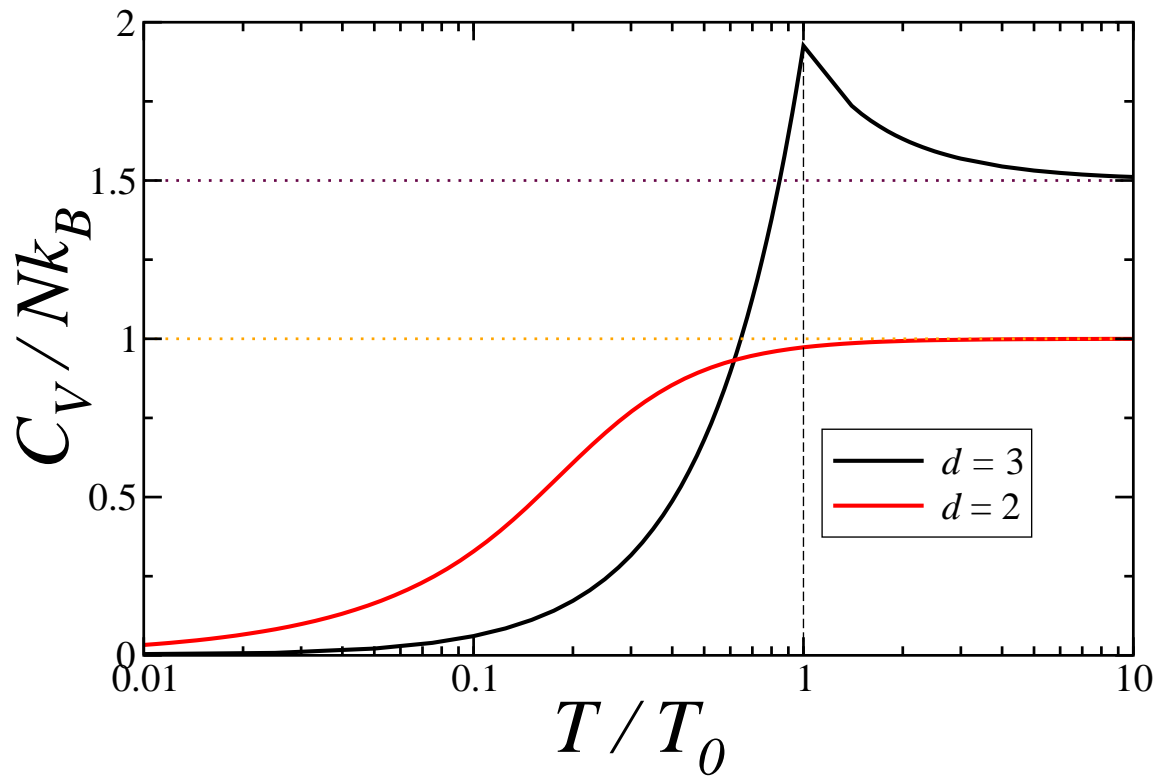


Figura 2.2: Calor específico de un gas ideal de bosones en 3D y 2D

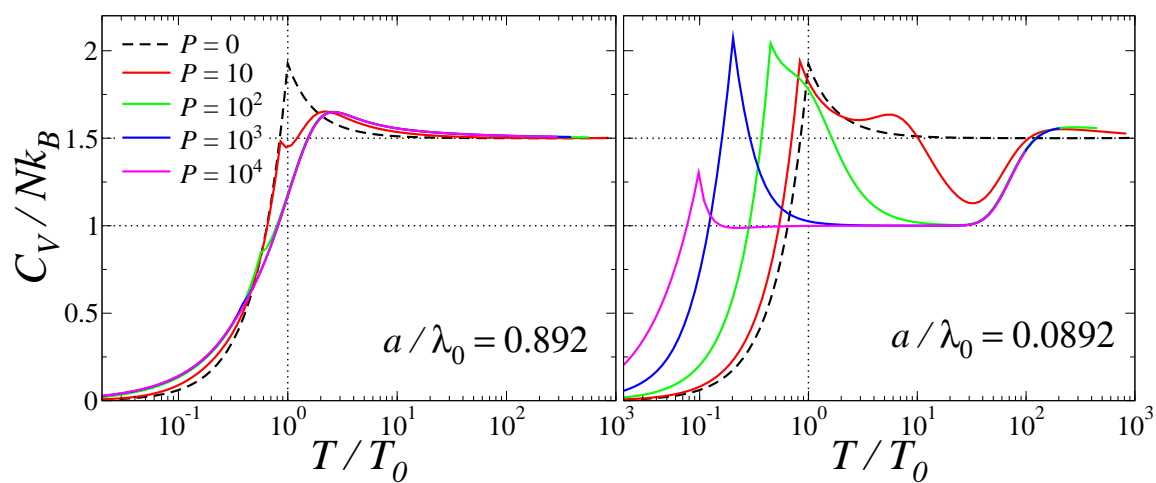


Figura 2.3: Calor específico en unidades de Nk_B como función de la temperatura adimensional T/T_0 de un gas de bosones ideales, confinados en la dirección z por un potencial periódico de Kronig-Penney.

Capítulo 3

Espectro de energías de partículas en una caja impenetrable entre \mathcal{M} potenciales delta

Nos proponemos estudiar el sistema de N bosones con un número finito \mathcal{M} de potenciales δ en la dirección z . Dado que el espectro de energía del sistema de interés resulta separable en las tres direcciones euclidianas de un sistema de referencia, es decir, $\varepsilon = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$, nos limitaremos al cálculo explícito del espectro de energía en la dirección z .

Cuando en esta dirección las partículas se encuentran confinadas por una caja de potencial impenetrable de longitud $L_z = (\mathcal{M}+1)a$ y \mathcal{M} potenciales de tipo δ contenidos en la caja y separados por una distancia a .

3.1. Potencial de confinamiento con uno y dos potenciales δ en una caja de potencial impenetrable

Con el propósito de guiar al lector en el cálculo del espectro de energía para un potencial de \mathcal{M} δ 's presentamos en esta sección una discusión del caso de una caja de potencial con una y dos deltas repulsivas. En el caso de dos deltas, se introduce el método de la matriz de transferencia el cual es usado en el caso general con \mathcal{M} deltas.

3.1.1. Para una delta

De manera análoga a la Sec. 2.2, resolvemos la ecuación de Schrödinger con la siguiente barrera de potencial delta en el origen, donde Λ es la intensidad

$$V(z) = \Lambda\delta(z) \quad (3.1)$$

Por simplicidad, los efectos del potencial de caja impenetrable son incluidos explícitamente en las condiciones de frontera $\psi_1(-a) = \psi_2(a) = 0$ (donde $z = a$ y $z = -a$ corresponden a las posiciones de los extremos de la caja). El valor de la corriente de probabilidad $j = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}]$, bajo estas condiciones de frontera es $j = 0$. La barrera divide a la caja en dos regiones y dado que el potencial es cero excepto en el origen, la solución general a la ecuación (2.11) puede escribirse como

$$\psi_1 = A_1 e^{i\alpha z_1} + B_1 e^{-i\alpha z_1} \quad -a < z < 0 \quad (3.2)$$

$$\psi_2 = A_2 e^{i\alpha z_2} + B_2 e^{-i\alpha z_2} \quad 0 < z < a \quad (3.3)$$

donde $\alpha = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$.

De manera convencional se impone la condición de continuidad de la función de onda

en el origen, donde se encuentra el potencial delta

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (3.4)$$

sin embargo, debida a la naturaleza singular de la delta, la derivada de ψ resulta discontinua

$$\psi_1'(0) \neq \psi_2'(0). \quad (3.5)$$

En los extremos $z = \pm a$, la función de onda se anula, es decir

$$\psi_1(-a) = \psi_2(a) = 0. \quad (3.6)$$

Para evaluar (3.4), empleamos (3.2) y (3.3) obteniendo

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2. \quad (3.7)$$

En el caso $\psi_2'(0) - \psi_1'(0)$ integramos la ecuación de Schrödinger (2.11) entre $-\varepsilon$ y ε donde en la región que va de $-\varepsilon$ a 0 usamos que $\psi = \psi_1$ y en la región que va de 0 a ε empleamos $\psi = \psi_2$, de este modo tenemos

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + V(z)\psi(z) - E\psi(z) \right] dz = 0. \quad (3.8)$$

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

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} E\psi(z) dz = 0$$

y por otro

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} dz + \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \lambda \delta(z) \psi(z) dz = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2'(0) - \psi_1'(0)) + \lambda \psi_1(0). \quad (3.9)$$

Así, sustituyendo (3.2) y (3.3) en (3.9) tenemos

$$A_1 \left(-\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) + B_1 \left(\frac{-2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + A_2 - B_2 = 0 \quad (3.10)$$

y para los extremos de la caja

$$A_1 e^{-i\alpha a} + B_1 e^{i\alpha a} = 0, \quad (3.11)$$

$$A_2 e^{i\alpha a} + B_2 e^{-i\alpha a} = 0. \quad (3.12)$$

Las ecuaciones (3.7), (3.10), (3.11) y (3.12) conforman un sistema de ecuaciones homogéneo de cuatro incógnitas, que tiene como sabemos solución distinta a la trivial, sólo si su determinante es cero, es decir,

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ -\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 & -\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & 1 & -1 \\ e^{-i\alpha a} & e^{i\alpha a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} \end{vmatrix} = 0. \quad (3.13)$$

Desarrollando el determinante obtenemos la relación de dispersión que nos da información sobre las energías que pueden tener las partículas con determinado vector de onda α , explícitamente

$$(\sin \alpha a) (\cos \alpha a + P \sin \alpha a) = 0 \quad (3.14)$$

con

$$P = \frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2}, \quad (3.15)$$

que da la impermeabilidad de los planos al estar en términos de la intensidad Λ . Como se muestra en la figura (3.2), para $P = 0, 1, 10, 100$ hay niveles fijos, dados por

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \quad (3.16)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots$, que corresponden al espectro de energía de una caja de longitud a obtenidas por las soluciones de $\sin(\alpha a) = 0$ en la ecuación (3.14) representados como puntos rojos de la figura (3.1).

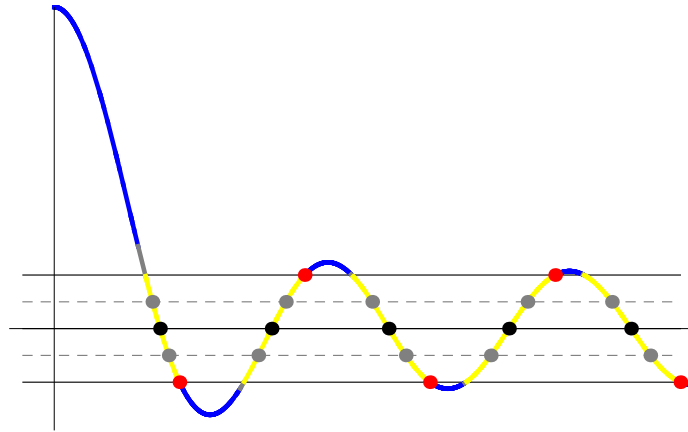


Figura 3.1: Energías para uno y dos planos dada una P .

Para las soluciones de $\cos \alpha a + P \sin \alpha a = 0$, los niveles se modifican al cambiar la intensidad de la delta y por lo tanto dependen de P . Dichos niveles corresponden a los puntos negros en la misma figura y se concentran a los niveles fijos de la figura (3.2) para valores grandes de P , las regiones amarillas corresponde a los posibles valores permitidos de las energías.

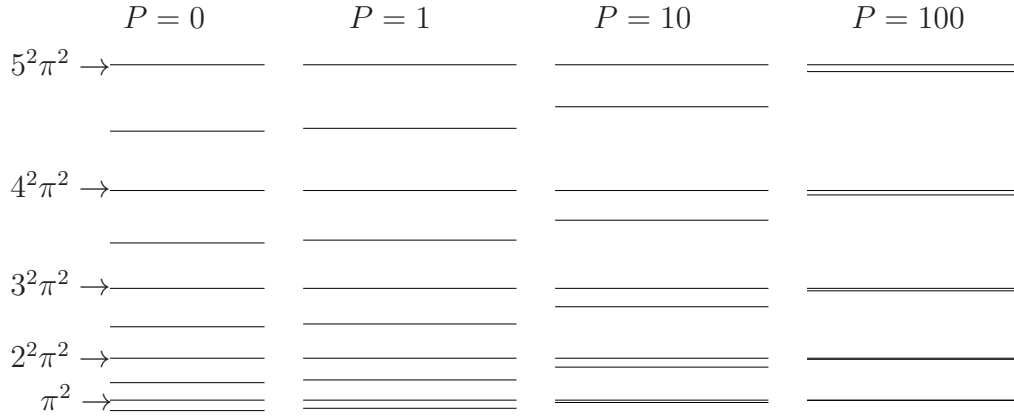


Figura 3.2: Niveles de energía para un plano con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$

3.1.2. Para dos deltas

De la ecuación (2.11) ahora con la barrera de potencial definida por

$$V(z) = \Lambda [\delta(z - a) + \delta(z - 2a)] \quad (3.17)$$

tenemos para la región I la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{1,2}}{dz^2} + V(z)\psi_{1,2} = E\psi_{1,2} \quad (3.18)$$

con ψ_1 definida en $0 < z < a$ y ψ_2 en $a < z < 2a$.

Proponemos las siguientes soluciones

$$\psi_1(z) = A_1 e^{iaz} + B_1 e^{-iaz} \quad 0 < z < a \quad (3.19)$$

$$\psi_2(z) = A_2 e^{iaz} + B_2 e^{-iaz} \quad a < z < 2a. \quad (3.20)$$

De igual manera imponemos la condición de continuidad en la función de onda en a

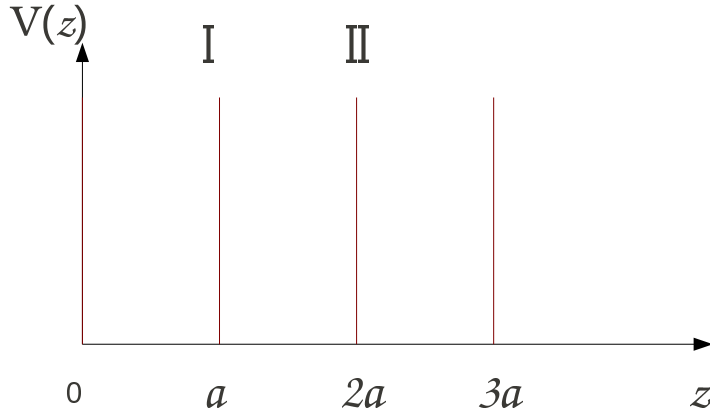


Figura 3.3: Potencial de Kronig-Penney con dos planos

donde tenemos el potencial delta, y dada la naturaleza de dicha delta, la derivada en ψ es discontinua en a , teniendo las siguientes condiciones

$$\psi_1(a) = \psi_2(a) \quad (3.21)$$

$$\psi'_1(a) \neq \psi'_2(a) \quad (3.22)$$

evaluando la condición de continuidad (3.21) y usando las soluciones de la ecuación de Schrödinger (3.19) y (3.20) tenemos

$$A_1 e^{i\alpha a} + B_1 e^{-i\alpha a} = A_2 e^{i\alpha a} + B_2 e^{-i\alpha a}. \quad (3.23)$$

Para la discontinuidad en la derivada nuevamente integramos la ecuación de Schrödinger en el intervalo $a - \epsilon < z < a + \epsilon$ y tomamos el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$, obteniendo una expresión análoga a (3.9), donde evaluamos (3.19) y (3.20) de tal manera llegamos a

la siguiente expresión

$$A_1 e^{i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + B_1 e^{-i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) - A_2 e^{i\alpha a} + B_2 e^{-i\alpha a} = 0. \quad (3.24)$$

Para la región II la ecuación de Schrödinger es

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{2,3}}{dz^2} + V(z)\psi_{2,3} = E\psi_{2,3} \quad (3.25)$$

con ψ_2 definida en la región como antes y ψ_3 en $2a < z < 3a$, análogamente proponemos soluciones generales de la forma

$$\psi_2(z) = A_2 e^{i\alpha z} + B_2 e^{-i\alpha z} \quad (3.26)$$

$$\psi_3(z) = A_3 e^{i\alpha z} + B_3 e^{-i\alpha z} \quad (3.27)$$

obteniendo

$$A_2 e^{2i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + B_2 e^{-2i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) - A_3 e^{2i\alpha a} + B_3 e^{-2i\alpha a} = 0. \quad (3.28)$$

Para los extremos se tiene

$$\psi_1(0) = 0 \quad (3.29)$$

y

$$\psi_3(3a) = 0 \quad (3.30)$$

que nos dan las siguientes condiciones

$$A_1 + B_1 = 0 \quad (3.31)$$

$$A_3 e^{3i\alpha a} + B_3 e^{-3i\alpha a} = 0. \quad (3.32)$$

De tal manera que obtenemos el siguiente sistema homogéneo de 6 ecuaciones en las incógnitas $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3$.

$$A_1 e^{i\alpha a} + B_1 e^{-i\alpha a} = A_2 e^{i\alpha a} + B_2 e^{-i\alpha a} \quad (3.33)$$

$$A_1 e^{i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + B_1 e^{-i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) = A_2 e^{i\alpha a} - B_2 e^{-i\alpha a} \quad (3.34)$$

$$A_2 e^{2i\alpha a} + B_2 e^{-2i\alpha a} = A_3 e^{2i\alpha a} + B_3 e^{-2i\alpha a} \quad (3.35)$$

$$A_2 e^{2i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) + B_2 e^{-2i\alpha a} \left(\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \right) = A_3 e^{2i\alpha a} - B_3 e^{-2i\alpha a} \quad (3.36)$$

$$A_1 + B_1 = 0 \quad (3.37)$$

$$A_3 e^{3i\alpha a} + B_3 e^{-3i\alpha a} = 0 \quad (3.38)$$

para resolver el sistema de ecuaciones es conveniente escribirlo como el siguiente arreglo de matrices, donde (3.33) y (3.34) se pueden escribir como:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & -\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\alpha a} \\ B_1 e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 e^{i\alpha a} \\ B_2 e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

y (3.35), (3.36) de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & -\frac{2m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 e^{2i\alpha a} \\ B_2 e^{-2i\alpha a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 e^{2i\alpha a} \\ B_3 e^{-2i\alpha a} \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Siendo la matriz inversa de

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

la ecuación (3.39) la podemos reescribir como

$$\begin{pmatrix} A_2 e^{i\alpha a} \\ B_2 e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 e^{i\alpha a} \\ B_1 e^{-i\alpha a} \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

que a su vez el vector columna lo podemos reescribir como el producto de la matriz diagonal con los elementos e^{ika} , e^{-ika} obteniendo:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Análogamente a la matriz (3.40) la podemos reescribir como

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{2i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-2i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

llamando a

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

entonces sustituyendo (3.43) en (3.44) tenemos

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{2i\alpha a} \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-2i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha a} \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}.$$

Dado que

$$\begin{pmatrix} e^{2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-2i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

entonces tenemos

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{2i\alpha a} \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha a} \end{pmatrix}^2 \left[\mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix} \right]^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

llamemos a

$$\bar{\mathbb{M}} = \mathbb{M} \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha a} \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

El cuadrado de $\bar{\mathbb{M}}$ puede evaluarse empleando el teorema de Caley-Hamilton [43], el cual establece que $\bar{\mathbb{M}}$ misma satisface la ecuación característica de eigenvalores asociada a ella, es decir,

$$\bar{\mathbb{M}}^2 - \bar{\mathbb{M}} \text{Tr}\bar{\mathbb{M}} + \det \bar{\mathbb{M}} = 0. \quad (3.49)$$

Nótese que [44]

$$\det \bar{\mathbb{M}} = 1 \quad (3.50)$$

y

$$\frac{1}{2} \text{Tr}\bar{\mathbb{M}} = \left[\frac{m\Lambda}{k\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a) \right], \quad (3.51)$$

de modo que

$$\bar{\mathbb{M}}^2 = \begin{pmatrix} e^{i\alpha a} \left(\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) & e^{-i\alpha a} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \\ -e^{i\alpha a} \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} & e^{-i\alpha a} \left(\frac{-m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1 \right) \end{pmatrix} 2 \left[\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a) \right] - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

entonces

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha a} \end{pmatrix}^2 \bar{\mathbb{M}}^2 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.52)$$

después una serie de cálculos llegamos a

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} [e^{i\alpha a} (\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1) 2[\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a)] - 1] & e^{-3i\alpha a} (\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}) 2[\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a)] \\ e^{3i\alpha a} (-\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}) 2[\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a)] & e^{2i\alpha a} [e^{-i\alpha a} (\frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} + 1) 2[\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a)] - 1] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

llamando a

$$\tau = \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \quad (3.53)$$

y

$$\eta = \frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a), \quad (3.54)$$

de tal manera que podemos reescribirlo de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} [e^{i\alpha a} (\tau + 1) 2\eta - 1] & e^{-3i\alpha a} (\tau 2\eta) \\ e^{3i\alpha a} (-\tau 2\eta) & e^{2i\alpha a} [e^{-i\alpha a} (\tau - 1) 2\eta] - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

y podemos observar que la matriz que relaciona $\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}$ con $\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$ puede escribirse como

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a} [P_{11}] & e^{-3i\alpha a} [P_{12}] \\ e^{3i\alpha a} [P_{12}^*] & e^{2i\alpha a} [P_{11}^*] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

donde $P_{11} = [e^{i\alpha a} (\tau + 1) 2\eta - 1]$ y $P_{12} = (\tau 2\eta)$.

Las condiciones de frontera para los extremos en la región I y III de la ecuación de Schrödinger, donde la función de onda se anula son:

$$\psi_1(0) = 0, \quad \text{en} \quad z = 0 \quad (3.57)$$

es decir

$$A_1 + B_1 = 0, \quad (3.58)$$

y donde hemos usado

$$\psi_3(3a) = 0, \quad \text{en} \quad z = 3a \quad (3.59)$$

que equivale a

$$A_3 e^{3i\alpha a} + B_3 e^{-3i\alpha a} = 0. \quad (3.60)$$

Las ecuaciones (3.55), (3.58) y (3.60), forman un conjunto homogéneo de 4 ecuaciones con 4 incógnitas cuyas soluciones se obtienen de calcular el siguiente determinante:

$$\det \begin{pmatrix} e^{-2i\alpha a}[P_{11}] & e^{-3i\alpha a}[P_{12}] & -1 & 0 \\ e^{3i\alpha a}[P_{12}^*] & e^{2i\alpha a}[P_{11}^*] & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{3i\alpha a} & e^{-3i\alpha a} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.61)$$

entonces

$$\begin{aligned} 0 &= -P_{12} + e^{i\alpha a} P_{11} - e^{-i\alpha a} P_{11}^* + P_{12}^* \\ &= [e^{i\alpha a} P_{11} - P_{12}] - [e^{-i\alpha a} P_{11}^* - P_{12}^*] \\ &= \text{Im}[e^{i\alpha a} P_{11} - P_{12}] \\ &= \text{Im}[e^{i\alpha a} (e^{i\alpha a} (\tau + 1) 2\eta - 1) - 2\tau\eta] \end{aligned}$$

sustituyendo τ y η dados en (3.53) y (3.54) respectivamente, llegamos a

$$\left[2 \cos(\alpha a) + 2 \sin(\alpha a) \frac{m\Lambda}{\alpha \hbar^2} \right]^2 = 1 \quad (3.62)$$

$$\implies \cos(\alpha a) + \sin(\alpha a) \frac{m\Lambda}{\alpha \hbar^2} = \pm 1/2 \quad (3.63)$$

que es la relación de dispersión para dos potenciales deltas. Como en el caso de una delta los niveles fijos están dados por (3.86) que corresponden a los puntos rojos de la figura (3.1), también se puede observar que en cada banda permitida (región amarilla) hay tres niveles, los que se concentran a los niveles fijos al aumentar la intensidad de la delta P (ver figura 3.4) son representados por los puntos grises calculados de (3.63).

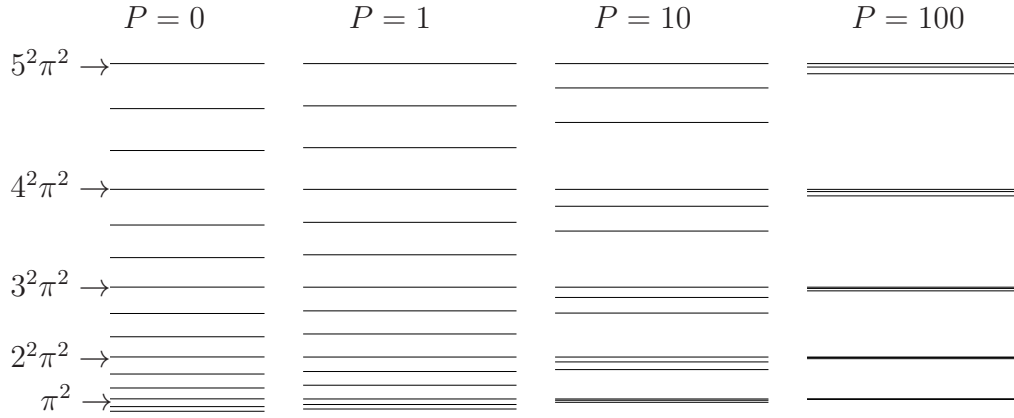


Figura 3.4: Niveles de energía para dos planos con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$

Como veremos en la siguiente sección, (3.63) cumple con la expresión (3.81), que es el caso general para \mathcal{M} deltas, pues se tiene que el $\cos(\alpha a) + (\frac{m\Lambda}{\alpha h^2}) \text{sen}(\alpha a) = \cos(\frac{n\pi}{3})$ con $n = 1, 2$. El tercer nivel es calculado a partir de $\cos \alpha a + (\frac{m\Lambda}{\alpha h^2}) \text{sen} \alpha a = (-1)^j$, donde j denota la j -ésima región donde hay solución (región amarilla en la figura 3.1).

3.2. Partícula constreñida en una caja de potencial impenetrable con \mathcal{M} potenciales delta equidistantes

El procedimiento presentado en la sección anterior puede generalizarse al caso de \mathcal{M} deltas, consideremos como antes la función de onda dada por:

$$\psi_j(z) = A_j e^{i\alpha z} + B_j e^{-i\alpha z} \quad z_{j-1} \leq z \leq z_j, \quad j = 1, \dots, \mathcal{M} + 1, \quad (3.64)$$

con la siguiente barrera de potencial

$$V(z) = \sum_{i=1}^{\mathcal{M}} \Lambda \delta(z - ia). \quad (3.65)$$

Procediendo como en la sección anterior tenemos $2(\mathcal{M} + 1)$ ecuaciones, $2\mathcal{M}$ que provienen de la continuidad de la función de onda y la discontinuidad de sus derivadas en las posiciones de las deltas, explícitamente éstas son

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

que podemos escribir como

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} e^{i\alpha z_j} \\ B_{j+1} e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j e^{i\alpha z_j} \\ B_j e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Dado que los vectores columna en la ecuación (3.66) pueden reescribirse como el producto de la matriz diagonal con elementos $e^{i\alpha z_j}$, $e^{-i\alpha z_j}$, podemos escribir explícitamente la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

con la definición

$$\mathbb{P}_j \equiv \mathbb{E}_j^{-1} \mathbb{M}_j \mathbb{E}_j, \quad (3.68)$$

$$\mathbb{M}_j \equiv \begin{pmatrix} \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 & \frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} \\ -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} & -\frac{m\Lambda_j}{i\alpha\hbar^2} + 1 \end{pmatrix}, \quad (3.69)$$

$$\mathbb{E}_j \equiv \begin{pmatrix} e^{i\alpha z_j} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha z_j} \end{pmatrix}, \quad (3.70)$$

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

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

$$A_1 + B_1 = 0, \quad (3.71)$$

$$A_{\mathcal{M}+1}e^{i\alpha L} + B_{\mathcal{M}+1}e^{-i\alpha L} = 0. \quad (3.72)$$

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

$$\begin{pmatrix} A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = \mathbb{P}_{\mathcal{M}}\mathbb{P}_{\mathcal{M}-1} \cdots \mathbb{P}_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

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

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

En los casos anteriores de una y dos deltas, fue directo encontrar la relación de dispersión debido a que el cálculo de $\bar{\mathbb{M}}$ y $\bar{\mathbb{M}}^2$ es inmediato. Para el caso general que ahora se discute, se necesita evaluar $\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}}$, para ello procedemos como sigue.

Dado que la matriz de transferencia $\bar{\mathbb{M}}$ es de la forma [44]

$$\bar{\mathbb{M}} = \begin{pmatrix} v & w \\ w^* & v^* \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

con $w = \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} e^{-i\alpha a}$ y $v = [1 + \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2}] e^{i\alpha a}$, sólo dos elementos son independientes, más aún la conservación del flujo de corriente requiere que el $\det \bar{\mathbb{M}} = |v|^2 - |w|^2 = 1$ [44], el cual nos deja sólo con un parámetro independiente. Nótese que $\bar{\mathbb{M}}$ se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{M}} &= \begin{pmatrix} \text{Re}(v) + i\text{Im}(v) & w \\ w^* & \text{Re}(v) - i\text{Im}(v) \end{pmatrix} \\ &= \text{Re}(v) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} i\text{Im}(v) & w \\ w^* & -i\text{Im}(v) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

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

Denotemos por \mathbb{G} a la segunda matriz de la expresión anterior, esta satisface $\text{Tr}(\mathbb{G}) = 0$, más aún, usando $\text{Re}^2(v) + \text{Im}^2(v) - |w|^2 = 1$, encontramos que

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

y podemos renombrar a \mathbb{G} escribiéndola como

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

con estas consideraciones tenemos

$$\bar{\mathbb{M}} = \text{Re}(v) \mathbb{I} + i\sqrt{1 - \text{Re}^2(v)} \mathbb{G} \quad (3.75)$$

o equivalentemente

$$\bar{\mathbb{M}} = \cos p \mathbb{I} + i \sin p \mathbb{G}, \quad (3.76)$$

donde $\cos p \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(\bar{\mathbb{M}})$ y $\mathbb{G}^2 = \mathbb{I}$. Esta última propiedad de \mathbb{G} nos permite escribir finalmente

$$\bar{\mathbb{M}} = e^{ip\mathbb{G}} \quad (3.77)$$

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

$$\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}} = e^{i\mathcal{M}p\mathbb{G}}. \quad (3.78)$$

Escribiendo $\bar{\mathbb{M}}^{\mathcal{M}} = \cos(\mathcal{M}p)\mathbb{I} + i \sin(\mathcal{M}p)\mathbb{G}$ tenemos que las ecuaciones (3.73) pueden ser reescritas como

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

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

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

que puede se escrita como

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

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

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

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} & -1 & 0 \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & e^{i\alpha L} & e^{-i\alpha L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_{\mathcal{M}+1} \\ B_{\mathcal{M}+1} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.79)$$

La condición de solubilidad del sistema de ecuaciones se determina pidiendo que el determinante de la matriz de 4×4 en la ecuación (3.79) se anule, explícitamente

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

o

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

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

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

Dado que $w = \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} e^{-i\alpha a}$ y $v = \left[1 + \frac{m\Lambda}{i\alpha\hbar^2} \right] e^{i\alpha a}$ (ver definición de $\bar{\mathbb{M}}$, ecuación (3.74)),

tenemos que

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

$$\Rightarrow$$

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

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

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

que puede ser puesto en la forma

$$\operatorname{sen} \alpha a [\operatorname{sen}(\mathcal{M} - 1)p - 2 \operatorname{sen} \mathcal{M} p \cos p] = 0, \quad (3.80)$$

donde hemos usado que $\cos p = (m\Lambda/\alpha\hbar^2) \operatorname{sen} \alpha a + \cos \alpha a$. Haciendo uso de la relación de recurrencia para los polinomios de Chebyshev: $\operatorname{sen}(n+1)\theta - 2 \cos \theta \operatorname{sen} n\theta + \operatorname{sen}(n-1)\theta$ (ver por ejemplo [45]) las condiciones de la ecuación (3.80) se reescriben como

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

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

$$\boxed{\frac{m\Lambda}{\alpha\hbar^2} \operatorname{sen} \alpha a + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1}}. \quad (3.81)$$

De esta última ecuación se puede notar que existen en principio $\mathcal{M} + 2$ valores distintos para la energía (para cada banda) que corresponde a los valores $n = 0, 1, \dots, \mathcal{M} + 1$. Sin embargo sólo $\mathcal{M} + 1$ valores son aceptables, de modo que debemos conformar un criterio para discriminar uno de los $\mathcal{M} + 2$ posibles niveles.

El criterio lo da la ecuación (3.81) donde pedimos que el $\text{sen } \alpha a = 0 \Leftrightarrow \alpha a = p a$ con $p \in \mathbb{Z}$, de modo que (3.80) se reduce a el $\cos \alpha a = (-1)^p$, obteniendo la siguiente expresión $(-1)^p = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M}+1}$, se puede notar que p denota cada banda (usualmente la llamamos j), así cuando el índice de banda es par uno debe elegir $n = 0$ y el conjunto de soluciones apropiada está dado por las soluciones de (3.83) cuando $n = 0, 1, \dots, \mathcal{M}$, si el índice de banda es impar se debe elegir $n = \mathcal{M} + 1$ y el conjunto de soluciones apropiada está dada por las soluciones de (3.83) cuando $n = 1, \dots, \mathcal{M} + 1$.

En las siguientes figuras 3.1-3.3 se explicará como se comportan los niveles de energía ya que se observa que hay niveles fijos y otros se comienzan a concentrar hacia los fijos, conforme aumentamos la intensidad de la delta.

Primero partamos de la ecuación (3.81) a la cual multiplicaremos por (a/a) , de tal manera que nos queda

$$\frac{m\Lambda a}{\hbar^2} \frac{\text{sen } \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \quad (3.82)$$

o equivalentemente

$$P \frac{\text{sen } \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1}; \quad \text{con } P = \frac{m\Lambda a}{\hbar^2}. \quad (3.83)$$

En el límite termodinámico haciendo tender $\mathcal{M} \rightarrow \infty$, recuperamos la expresión (2.65) del Capítulo dos, definiendo $k = n\pi/(\mathcal{M} + 1)a$.

Si $P = 0$ tenemos

$$\cos \alpha a = \cos \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \Rightarrow \alpha a = \frac{n\pi}{\mathcal{M} + 1} \Rightarrow (\alpha a)^2 = \frac{n^2 \pi^2}{(\mathcal{M} + 1)^2} \quad (3.84)$$

recordemos que

$$\alpha^2 \equiv \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \frac{a}{a} \quad (3.85)$$

$$\Rightarrow \varepsilon = \frac{\alpha^2 a^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2 (\mathcal{M} + 1)^2}, \quad (3.86)$$

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

Ahora si $P \rightarrow \infty$ los niveles de energía que tenemos es para sólo una de las cajas de longitud a

$$\varepsilon = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (3.87)$$

Con estas dos expresiones podemos ahora entender mejor el comportamiento de los niveles que se muestran, de aquí vemos que hay niveles que son fijos y estos están dados por la expresión (3.87) esto es cuando $P \rightarrow \infty$, también observamos que estos niveles fijos aumentan en energía conforme se aumenta el número de deltas, esto es, para una delta el nivel fijo será $n = 2$, si hay dos deltas el nivel fijo será para $n = 3$ de tal modo que con n deltas habrá $(\mathcal{M} + 1)$ niveles, esto ocurre para cualesquiera que sean la intensidad de la delta y el número de deltas como se ve en las figuras 3.1-3.3.

Esto es, llamemos a

$$\alpha a = l\pi \quad l \in N \quad (3.88)$$

$$\cos(l\pi) = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)}, \quad (3.89)$$

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

$$(-1)^l = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)}, \quad (3.90)$$

si $l = 1$ entonces

$$-1 = \cos \frac{n\pi}{(\mathcal{M} + 1)} \quad (3.91)$$

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

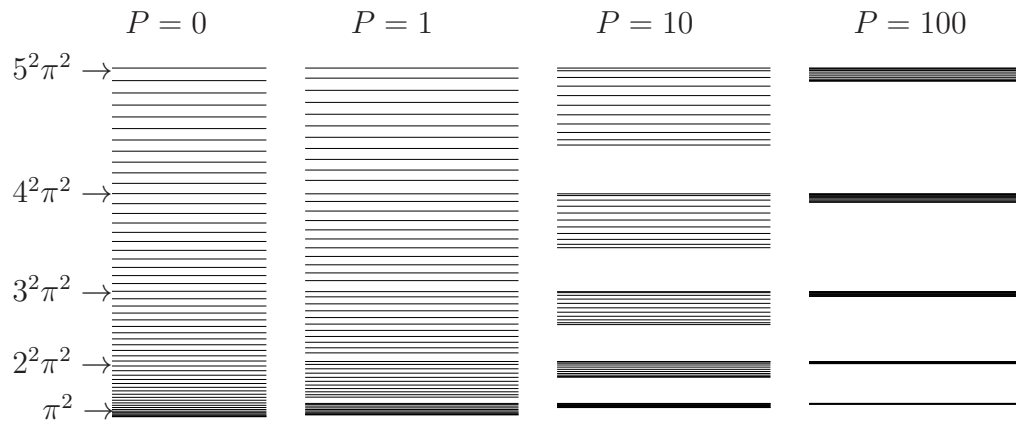


Figura 3.5: Niveles de energía para 10 planos con distinta impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100$

Capítulo 4

Termodinámica de un gas ideal de bosones en estructuras de capas del tipo $L_x \times L_y \times L_z$ con $L_{x,y} \rightarrow \infty$

4.1. Bosones entre capas delgadas

Los trabajos teóricos realizados por R.K. Pathria y colaboradores [35]-[39] y [47]-[49], acerca del gas ideal de Bose confinado en geometrías del tipo de “película delgada”, $\infty \times \infty \times L_z$, para describir la posible condensación de Bose-Einstein en películas delgadas de helio líquido, han sido considerados para entender la aparición de un máximo en el calor específico a determinada temperatura T^* , como una cuasi-condensación [48] y no estrictamente como una transición de fase, debido a los efectos de tamaño finito [49]. Dicho máximo, se corre hacia temperaturas más altas cuánto más pequeño es el “grosor” de la película L_z , de tal modo, que en el caso estrictamente bidimensional, $L_z = 0$, no queda traza de él (el máximo ocurre a una temperatura infinita). Por el contrario, en el límite $L_z \rightarrow \infty$, el máximo se convierte en un pico en la temperatura crítica de condensación Bose-Einstein, de un gas ideal de bosones en 3 dimensiones (cúspide en la curva negra de la figura 2.2).

Por otra parte, en las referencias [41, 42] se ha estudiado el caso del gas ideal de Bose confinado por un conjunto infinito de planos permeables y equidistantes. En el límite termodinámico y para valores finitos de los parámetros del sistema, la impenetrabilidad y la inter-distancia de las barreras, el sistema tiene una temperatura crítica de condensación finita y distinta de cero caracterizada por una cúspide en las curvas del calor específico como función de la temperatura donde también se exhiben los efectos del confinamiento, representados por mínimos locales.

En este trabajo generalizamos, por un lado, el sistema estudiado por Pathria y colaboradores en tanto que consideramos un gas ideal de Bose confinado en geometrías de multi-capas delgadas, permeables y finitas, sujetas a condiciones de frontera de Dirichlet en los bordes y por otro, también se exploran los efectos de la finitud del número de barreras en comparación con el estudio hecho cuando se consideraron un número infinito de bosones [41, 42].

En la primera sección se demuestra que en esta situación no hay temperatura crítica de condensación distinta de cero.

4.2. Bosones entre planos permeables dentro de una caja

Partimos de un sistema de N bosones que no interaccionan entre ellos, atrapados por \mathcal{M} potenciales delta de intensidad Λ , igualmente espaciadas dentro de una caja de longitud $L_z = (\mathcal{M} + 1)a$ en la dirección z y de longitud $L = L_x = L_y$ en las direcciones x y y respectivamente. El potencial de confinamiento está dado por

$$V(x, y, z) = \sum_{j=1}^{\mathcal{M}} \Lambda \delta(z - ja). \quad (4.1)$$

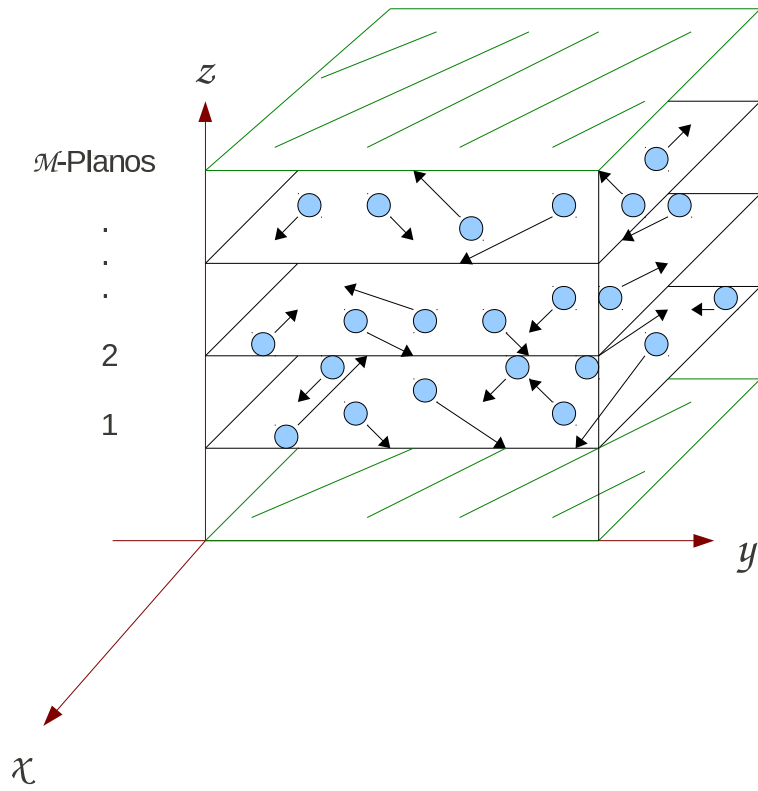


Figura 4.1: Sistema periódico en 3D de planos que representan deltas de Dirac. En las direcciones x y y son bosones que se mueven libremente y en la dirección z interactúan con las deltas de Dirac

El espectro de energía para cada bosón dentro de la estructura multicapas es como en (2.12) y (2.13), sólo que el potencial en la dirección z es finito y el espectro de energía viene de la siguiente relación de dispersión

$$\frac{P \operatorname{sen}(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos\left(\frac{n_z \pi}{\mathcal{M} + 1}\right), \quad n_z = 1, 2, \dots, \mathcal{M} + 1 \quad (4.2)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon_{k_z}}. \quad (4.3)$$

Multiplicando por a/a el argumento del coseno en la parte derecha de (4.2) tenemos

$$\frac{P \operatorname{sen}(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos\left(\frac{n_z \pi a}{(\mathcal{M} + 1)a}\right) \quad (4.4)$$

y llamemos

$$k_z = \frac{n_z \pi}{(\mathcal{M} + 1)a} \quad (4.5)$$

de modo que tenemos

$$\frac{P \operatorname{sen}(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(k_z a) \quad (4.6)$$

con

$$P \equiv P_0 \frac{a}{\lambda_0} = \frac{m \Lambda \lambda_0}{\hbar^2} \left(\frac{a}{\lambda_0}\right) \quad (4.7)$$

y $\lambda_0 = (2\pi\hbar^2/mk_B T_0)^{1/2}$ que es la longitud de onda térmica evaluada en la temperatura crítica de un gas ideal de bosones, en 3 dimensiones.

El número total de partículas está dado por la suma de aquellas en el estado base y los estados excitados

$$N = N_0 + N_e, \quad (4.8)$$

para el estado base la energía es

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{k_{x_0}} + \varepsilon_{k_{y_0}} + \varepsilon_{k_{z_0}(P,a,\mathcal{M})}. \quad (4.9)$$

Considerando el límite termodinámico (LT), es decir, el límite en que el número de partículas N y el volumen L^2d tienden a infinito de modo que el cociente entre ellas, llamada la densidad, es una constante se tiene

$$\varepsilon_{k_{x_0}} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2\pi)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \longrightarrow 0, \quad (4.10)$$

$$\varepsilon_{k_{y_0}} = \frac{\hbar^2}{2mL^2}(2\pi)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \longrightarrow 0, \quad (4.11)$$

por lo que sólo $\varepsilon_{k_{z_0}}$ contribuye a ε_0 si ε_{k_z} corresponde a la suma de todos niveles de todas las bandas, entonces

$$\begin{aligned} N &= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} \\ &= \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} \\ &= \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{x_0}} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} \\ &+ \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} \\ &= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{x_0}} + \varepsilon_{k_{y_0}} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \sum_{k_y \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{x_0}} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_{y_0}} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \\ &\sum_{k_x \neq 0}^{\infty} \sum_{k_y \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} + \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z \neq 0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}, \quad (4.12) \end{aligned}$$

donde hemos separado explícitamente el término que involucra al estado base.

Dividiendo entre el volumen ($V = L^2(\mathcal{M} + 1)a$) y tomando el límite termodinámico,

además haciendo tender las sumas a integrales teniendo $\sum_k^\infty \xrightarrow{LT} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk$, en la ecuación (4.12) los tres primeros términos valen cero, entonces

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \left[\int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} dk_x dk_y \right. \\ \left. + \sum_{k_z \neq 0} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_{z_0}} - \mu)} - 1} dk_x dk_y \right] \quad (4.13)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \left[\sum_{k_z=0} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1} dk_x dk_y \right]. \quad (4.14)$$

Empleando coordenadas polares circulares para integrar en las direcciones de k_x y k_y , tenemos

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \sum_{k_z=0} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{k_\perp dk_\perp d\theta}{z_1^{-1} e^{\beta \hbar^2 k_\perp^2 / 2m} - 1} \quad (4.15)$$

con k_\perp y θ definidas por $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$ y $\tan \theta = k_y/k_x$ respectivamente.

Con el siguiente cambio de variable

$$u \equiv \frac{\beta \hbar^2 k_\perp^2}{2m} \quad (4.16)$$

entonces

$$du = \frac{\beta \hbar^2 k_\perp}{m} dk_\perp, \quad (4.17)$$

la expresión (4.15) puede escribirse como

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} 2\pi \left(\frac{m}{\hbar^2 \beta} \right) \sum_{k_z=0} \int_0^\infty \frac{du}{z_1^{-1} e^u - 1}. \quad (4.18)$$

La integral en la ecuación anterior es la función de Bose $g_{1/2}(z_1)$ multiplicada por la

función gamma $\Gamma(1) = 1$ de modo que tenemos

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta} \sum_{k_z=0}^{\infty} g_1(z_1) \Gamma(1) \quad (4.19)$$

$$\frac{N}{V} = -\frac{1}{(\mathcal{M} + 1)a} \frac{m}{\hbar^2 \beta 2\pi} \sum_{k_z=0}^{\infty} \ln(1 - z_1) \quad (4.20)$$

donde hemos usado que $g_1(z) = -\ln(1 - z)$. Si empleamos la densidad de partículas para el caso de bosones en 3D

$$\eta_{3D} = \frac{N}{L^2(\mathcal{M} + 1)a} = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda_0^3}, \quad (4.21)$$

para adimensionalizar (4.21), la podemos reescribir como

$$1 = \frac{\lambda_0^3}{\zeta(3/2)(\mathcal{M} + 1)a} \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \sum_{k_z=0}^{\infty} g_1(z) \quad (4.22)$$

o equivalentemente como

$$1 = \frac{2\lambda_0}{\zeta(3/2)(\mathcal{M} + 1)a T_0} \sum_{k_z=0}^{\infty} g_1(z), \quad (4.23)$$

recordando que $\lambda_0^2 = 2\pi\hbar^2/mk_B T_0$.

Es de esta expresión, ecuación 4.23, de la que se obtiene el potencial químico como función de la temperatura, para el cálculo de las demas propiedades termodinámicas.

4.2.1. Energía Interna

La energía interna está dada por

$$U = \sum_{k_x=-\infty}^{\infty} \sum_{k_y=-\infty}^{\infty} \sum_{k_z=0}^{\infty} \frac{\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{k_z} - \mu)} - 1}. \quad (4.24)$$

Como se ve en las figuras (3.2, 3.4 y 3.5) el espectro tiene una estructura de bandas con distintos niveles, de modo que podemos agrupar la suma en k_z de todos los niveles de energía en sumas que dependan de cada banda con sus respectivos niveles. En la dirección k_y y k_x hacemos tender las sumas a integrales, como se hizo en la sección anterior, de modo que dividiendo por el volumen y tomado el límite termodinámico, la expresión para la energía interna es

$$U = \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{jb,jn} - \mu)} - 1} \quad (4.25)$$

donde j_b y j_n denotan el índice de banda y el índice de nivel respectivamente.

Si $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$, entonces

$$U = \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 2\pi \int_0^{\infty} dk_{\perp} k_{\perp} \frac{\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} + \varepsilon_{jb,jn} - \mu)} - 1} \quad (4.26)$$

empleando el siguiente cambio de variable

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{k_x} + \varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{\perp}^2, \quad d\varepsilon_{\perp} = \frac{\hbar^2}{m} k_{\perp} dk_{\perp} \quad (4.27)$$

tenemos

$$U = \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\perp} \frac{\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{k_{\perp}} + \varepsilon_{jb,jn} - \mu)} - 1}. \quad (4.28)$$

Otro cambio de variable, a decir,

$$x = \beta\varepsilon_{\perp}, \quad dx = \beta d\varepsilon_{\perp} \quad (4.29)$$

nos permite escribir (4.28) como

$$U = \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \left[\frac{1}{\beta^2} \int_0^{\infty} dx \frac{x}{e^x e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} dx \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{e^x e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]. \quad (4.30)$$

Así podemos reescribirla en términos de la función de Bose (definida en (2.25)) como

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

Adimensionalizando con $1/Nk_B T$ tenemos

$$\frac{U}{Nk_B T} = \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2 N} \left[k_B T g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \varepsilon_{jb,jn} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right]. \quad (4.31)$$

Consideremos nuevamente que la densidad de partículas de nuestro sistema corresponde a la de un gas de bosones libres en 3D, como se hizo en la ecuación (4.21), para ello multiplicaremos el lado derecho de (4.31) por $(\mathcal{M}+1)a/(\mathcal{M}+1)a$ y $k_B T_0/k_B T_0$, después de una serie de cálculos y agrupar términos semejantes tenemos

$$\begin{aligned} \frac{U}{Nk_B T} &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0}{(\mathcal{M}+1)a} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[\frac{T}{T_0} g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{jb,jn} - \mu}{k_B T_0} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\sqrt{4\pi}}{(\mathcal{M}+1)a} \gamma^{1/2} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[\frac{T}{T_0} g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \gamma g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right] \\ &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\sqrt{4\pi}}{(\mathcal{M}+1)a} \gamma^{1/2} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[\frac{T}{T_0} g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \gamma g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

donde

$$\gamma = \frac{1}{4\pi} \frac{\lambda_0^2}{a^2}. \quad (4.33)$$

4.2.2. Calor Específico

Una vez obtenida la expresión para la energía interna (4.32), se deriva con respecto a la temperatura a volumen constante y con ello encontramos el calor específico

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V. \quad (4.34)$$

Así, usando (4.32) tenemos

$$\begin{aligned} C_V &= \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \left[2k_B^2 T g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + k_B \varepsilon_{jb,jn} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right. \\ &+ (k_B T)^2 g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{jb,jn} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\ &\left. + \frac{\varepsilon_{jb,jn} T e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}} \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{jb,jn} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right], \quad (4.35) \end{aligned}$$

donde reconocemos en el último sumando la función de Bose de orden cero, la cual está dada por

$$g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) = \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}}, \quad (4.36)$$

de modo que

$$\begin{aligned} C_V &= \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{L^2 m}{2\pi \hbar^2} \left[2k_B^2 T g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + k_B \varepsilon_{jb,jn} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right. \\ &+ (k_B T)^2 g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{jb,jn} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\ &\left. + \varepsilon_{jb,jn} T g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{jb,jn} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right]. \quad (4.37) \end{aligned}$$

Adimensionalizando C_V con Nk_B y multiplicando el lado derecho de la ecuación anterior por a/a tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{aL^2m}{aNk_B2\pi\hbar^2} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \left[2k_B^2Tg_2(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) + k_B\varepsilon_{jb,jn}g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&+ \left. \varepsilon_{jb,jn} T g_0(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \quad (4.38)
\end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{\lambda_0^3 m}{\zeta(3/2)k_B a 2\pi\hbar^2} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \left[2k_B^2Tg_2(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) + k_B\varepsilon_{jb,jn}g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&+ \left. \varepsilon_{jb,jn} T g_0(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \quad (4.39)
\end{aligned}$$

o equivalentemente

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0}{a} \frac{1}{T_0 k_B^2} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \left[2k_B^2Tg_2(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) + k_B\varepsilon_{jb,jn}g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \right. \\
&+ (k_B T)^2 g_1(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \\
&+ \left. \varepsilon_{jb,jn} T g_0 \left(\frac{1}{k_B T^2}(\varepsilon_{jb,jn}-\mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right]. \quad (4.40)
\end{aligned}$$

Después de una serie de cálculos y agrupar términos tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{\lambda_0}{a} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[2 \frac{T}{T_0} g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{k_B T_0} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right. \\
&+ \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{k_B T_0} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{k_z}^2}{k_B^2 T T_0} g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \\
&+ \left. \left(\frac{1}{k_B T_0} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{k_B^2 T T_0} g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right) \left[T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right] \right]. \quad (4.41)
\end{aligned}$$

Escribimos el factor adimensional

$$\frac{\varepsilon_{jb,jn}}{k_B T_0} = \frac{\hbar}{2ma^2} \bar{\varepsilon} / k_B T_0 = \gamma \bar{\varepsilon} \quad (4.42)$$

con

$$\bar{\varepsilon} \equiv \varepsilon_{jb,jn} / (\hbar^2 / 2ma^2), \quad (4.43)$$

de modo que podemos reescribir a C_V de la siguiente forma

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

y a $\frac{\lambda_0}{a} = \sqrt{4\pi} \gamma^{1/2}$, teniendo la siguiente expresión para C_V

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

Como se verá en el cálculo, se adimensionaliza el potencial químico μ con $\frac{2ma^2}{\hbar^2}$, por lo que

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2} \left(T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right) = T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \quad (4.44)$$

entonces

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

usando (4.23) podemos reescribir a

$$\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn})} \right) \equiv \gamma \frac{T_0}{T}, \quad (4.45)$$

de modo que la expresión para el calor específico es

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

Análogamente para tener la misma densidad de partículas como en (4.21), sólo multiplicamos por $1/(\mathcal{M}+1)$, teniendo:

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{\zeta(3/2)} \frac{1}{(\mathcal{M}+1)} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[2\sqrt{4\pi}\gamma^{1/2} \frac{T}{T_0} g_2 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + 2\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2} \bar{\varepsilon} g_1 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right. \\ &\left. + \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon}^2 \frac{T_0}{T} g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) + \left[T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu} \right] \left(\gamma \frac{T_0}{T} + \sqrt{4\pi}\gamma^{5/2} \bar{\varepsilon} g_0 \left(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} \right) \right) \right] \quad (4.46) \end{aligned}$$

Para evaluar (4.46) necesitamos $T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu}$, la cual puede calcularse de (4.23) que en esta notación puede escribirse como

$$1 = -\frac{\lambda_0}{a} \frac{T}{T_0} \frac{1}{\zeta(3/2)} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{N+1} \ln[1 - e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}]. \quad (4.47)$$

Si derivamos (4.47) con respecto a la temperatura tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{-\lambda_0}{a} \frac{1}{T_0 \zeta(3/2)} \left[\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) \right. \\ &\quad \left. + T \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} (-1) \frac{e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}} \left(\frac{1}{k_B T^2} (\varepsilon_{jb,jn} - \mu) + \frac{1}{k_B T} \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right] \\ - \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) &= \frac{-T}{k_B T} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \left[\varepsilon_{jb,jn} - \mu + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \right] \\ - \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) &= \frac{-1}{k_B T} \left[\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right. \\ &\quad \left. + \left(T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu \right) \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]. \end{aligned}$$

De modo que

$$T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu = \frac{- \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) - \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}}{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{M+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}} \quad (4.48)$$

siendo adimensional al multiplicar por la siguiente constante $2ma^2/\hbar^2$, obteniendo:

$$\begin{aligned}
\left(T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu}\right) &= \frac{2ma^2}{\hbar^2} \left(T \frac{\partial \mu}{\partial T} - \mu\right) \\
&= \frac{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} k_B T \frac{2ma^2}{\hbar^2} \left[\ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) - \frac{\varepsilon_{jb,jn}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]}{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}}
\end{aligned} \tag{4.49}$$

finalmente multiplicando la anterior ecuación por T_0/T_0 obtenemos:

$$\begin{aligned}
\left(T \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial T} - \bar{\mu}\right) &= \frac{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[\frac{1}{\gamma} \frac{T}{T_0} \ln(1 - e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)}) - \frac{\bar{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]}{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}} \\
&= \frac{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \left[\frac{\zeta(3/2)}{\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2}} \frac{T}{T_0} - \frac{\bar{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]}{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}} \\
&= \frac{\left[\frac{\zeta(3/2)}{\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2}} \frac{T}{T_0} \sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} - \frac{\bar{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1} \right]}{\sum_{jb=1}^{\infty} \sum_{jn=1}^{\mathcal{M}+1} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)} - 1}} \\
&= \frac{\zeta(3/2)}{\sqrt{4\pi}\gamma^{3/2}} - \frac{\bar{\varepsilon} g_0(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)})}{g_0(e^{-\beta(\varepsilon_{jb,jn}-\mu)})}.
\end{aligned} \tag{4.50}$$

4.3. Resultados

A continuación presentamos los resultados del calor específico como función de la temperatura para diferentes valores de la impermeabilidad $P = 0, 1, 10, 100, 1000$; la distancia entre planos $a = 0.1, 1, 10, 100$ y el número de planos permeables $\mathcal{M} = 1, 10, 100, 1000$, donde los casos en que $P = 0$ corresponden a los resultados ya reportados en Pathria [35] donde sólo se observa un máximo.

Para tal propósito, se implementó el programa del cálculo numérico que a grandes rasgos está descrito en el diagrama de flujo (4.3), que resuelve numéricamente la

ec. (3.81) para encontrar el espectro de energía en la dirección z , para una P y \mathcal{M} dadas, dicha ecuación se resolvió usando el método de bisección [46]. Teniendo este espectro se calcula la fugacidad a partir de la ecuación (4.23) usando el método de Newton [46], para obtener las demás propiedades termodinámicas, específicamente, las expresiones (4.32), (4.50) y (4.46) como función de los parámetros P , a y \mathcal{M} . La evaluación de la fugacidad presenta problemas de precisión computacional debido a que a bajas temperaturas, $T/T_0 \lesssim 0.1$, la función $\ln(1 - z)$ que aparece en la expresión (4.23) diverge cuando el potencial químico se acerca al valor del estado base de energía. Este problema de precisión causó que algunas curvas de C_V/Nk_B vs T/T_0 se truncaran a temperaturas bajas. Resultados preliminares usando un programa que permite hacer cálculos con precisión arbitraria nos dicen que para ir a temperaturas tan bajas como $T/T_0 \lesssim 0.01$, son necesarios cálculos con 200 dígitos de precisión.

Para una separación entre deltas de longitud $a/\lambda_0 = 0.1$, que representa una distancia interplanar pequeña comparada con la longitud de correlación cuántica λ_0 , una delta ya es suficiente para observar efectos conspicuos. Como se observa en la gráfica (4.4), si aumentamos la intensidad P del plano permeable, se observa que aparecen máximos. En particular si $P = 0$, la distancia interplanar es $L = 2a$, este único máximo se corre hacia la derecha al aumentar a como lo describe Pathria en su artículo [35].

Como se puede ver en la figura (4.2) la curva continua muestra que conforme disminuye el tamaño de la caja, aumenta la temperatura característica para la que se observan los máximos del condensado que ocurren a una temperatura que corresponde a una caja de distancia interplanar $L = a$.

Otra peculiaridad es que para nuestro sistema tenemos un nuevo máximo que puede asociarse a un caso medio entre 2D y 3D, el cual puede explicarse cualitativamente a partir de la manera en que los niveles de energía en la dirección z cambian al variar P (ver por ejemplo Figura 3.2).

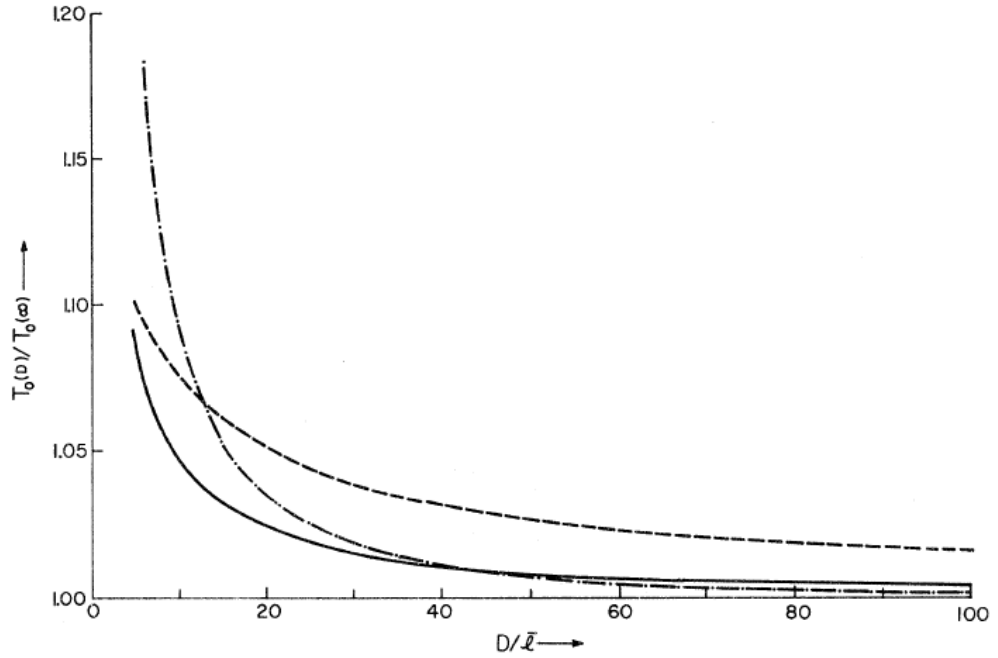


Figura 4.2: T/T_0 vs L/λ_0 , figura tomada de [35].

Es claro que para temperaturas muy bajas el sistema se comporta como en 2 dimensiones siempre que $k_B T \lesssim \varepsilon_{1,2} - \varepsilon_{1,1}$, es decir, sólo las energías en las direcciones x y y son las que contribuyen a la termodinámica (comparar con la Fig. 2.2). Esta característica puede observarse en la parte plana de C_V/Nk_B , donde toma el valor 1. Al aumentar la temperatura, se presentan las tres posibilidades siguientes:

i) Si $P = 0$ los niveles en la dirección comienzan a contribuir al C_V exhibiendo un máximo, originando una transición a un comportamiento tridimensional.

ii) Si $P \rightarrow \infty$ corresponde a la situación anterior excepto que la distancia entre los niveles es mayor dado que la longitud de la caja disminuyó y requiere mayor temperatura para pasar de un nivel a otro de mayor energía ocasionando la transición a un comportamiento tridimensional. Por lo tanto, se desplaza el máximo hacia temperaturas mayores.

iii) Si $P \neq 0$ y finita, los niveles de cada banda se corren hacia el nivel de energía que corresponde a los de una caja de potencial de longitud a . Este corrimiento disminuye la separación energética entre niveles dando lugar a que a temperaturas no tan grandes, se exciten mas niveles, que en el caso $P = 0$. Esta es la naturaleza del segundo máximo que aparece a temperaturas menores que la del máximo que describe Pathria. Nótese que este nuevo máximo se corre hacia temperaturas pequeñas conforme aumenta P .

Si aumentamos el número de deltas entonces agrandamos la longitud del sistema y observamos, como se muestra en las figuras 4.4, 4.5, 4.6 y 4.7, que los máximos comienzan a agudizarse, a aumentar el valor en C_V y a correrse hacia la temperatura característica para ciertos valores de P , haciéndose notar que hay una tendencia al sistema en tres dimensiones. Ahora si seguimos aumentando la longitud del sistema, pero en este caso lo que agrandamos es la distancia interplanar considerando que $a = 1$ con una delta, (ver figuras 4.8, 4.9 y 4.10) los máximos suaves también se agudizan y se corren hacia la temperatura característica $T/T_0 \simeq 1$.

En las figuras consecutivas (ver figuras 4.11, 4.12) se observa un comportamiento análogo, donde es más notorio que en el límite termodinámico los máximos se conviertan en cúspides a $T/T_0 \simeq 1$, esto implica que si agrando el sistema hay una tendencia a obtener el pico característico de la CBE en 3D.

Otro efecto que sobresale es el caso cuando la distancia entre deltas es muy chica $a = 0.1$ y conforme incrementamos el número de deltas de 1 a 10 (esto es que aumentamos el número de niveles en cada banda) observamos que los máximos además de agudizarse, también aumentan su valor en el calor específico C_V .

Continuando con el mismo caso podemos observar en las figuras (4.4) y (4.5) para $P = 10$ la región de temperaturas bajas caracterizada por C_V/Nk_B en la gráfica con una delta es incrementada al aumentar a 10 deltas, de tal forma que aparece un

nuevo máximo y el máximo que ya teníamos también aumenta corriéndose hacia la temperatura característica T_0 exhibiéndose dos máximos. Esto refleja una transición de dimensión de dos a tres. Si aumentamos el número de deltas aún más hay una tendencia a hacer un sólo máximo, la cual se parece al condensado en tres dimensiones.

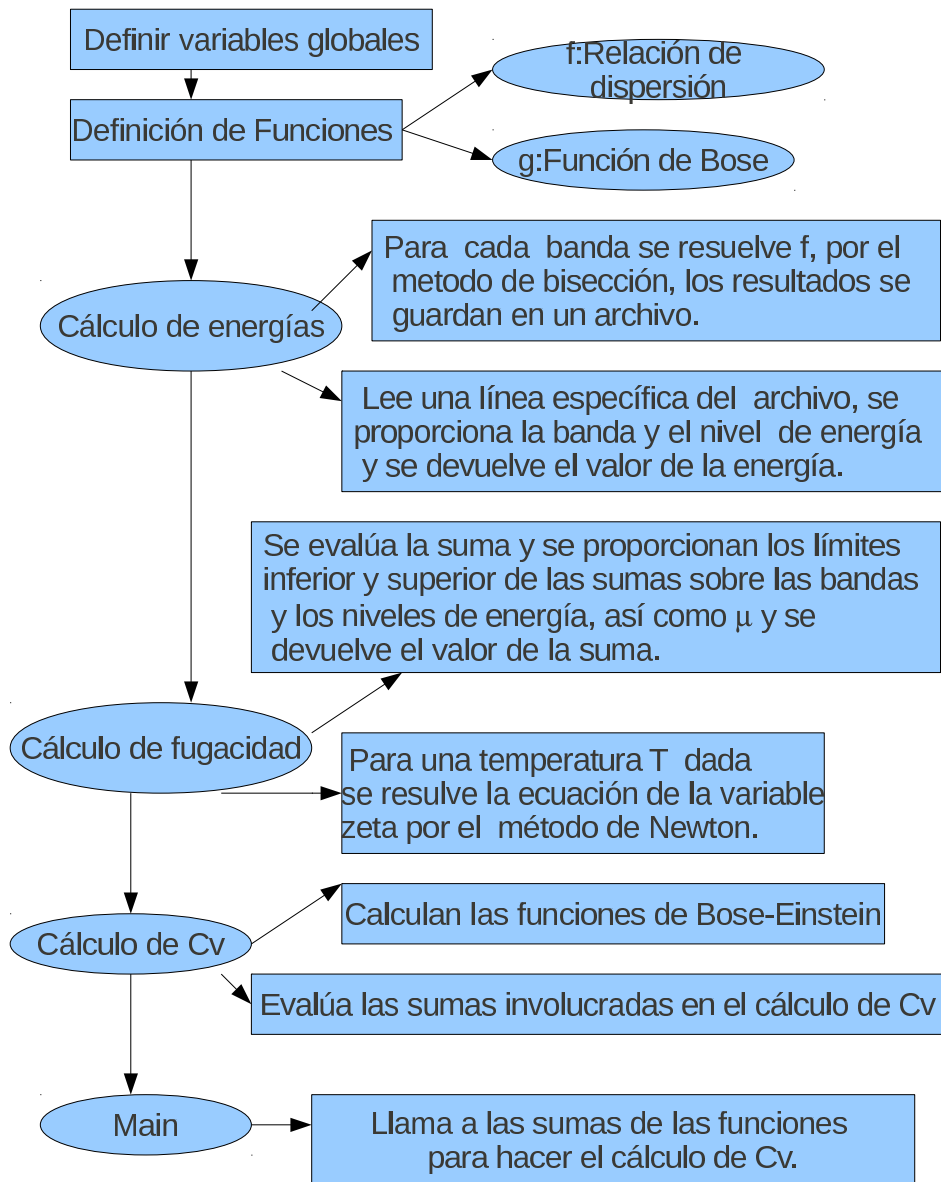


Figura 4.3: Diagrama de flujo computacional.

$a = 0.1, 1 \text{ delta}$

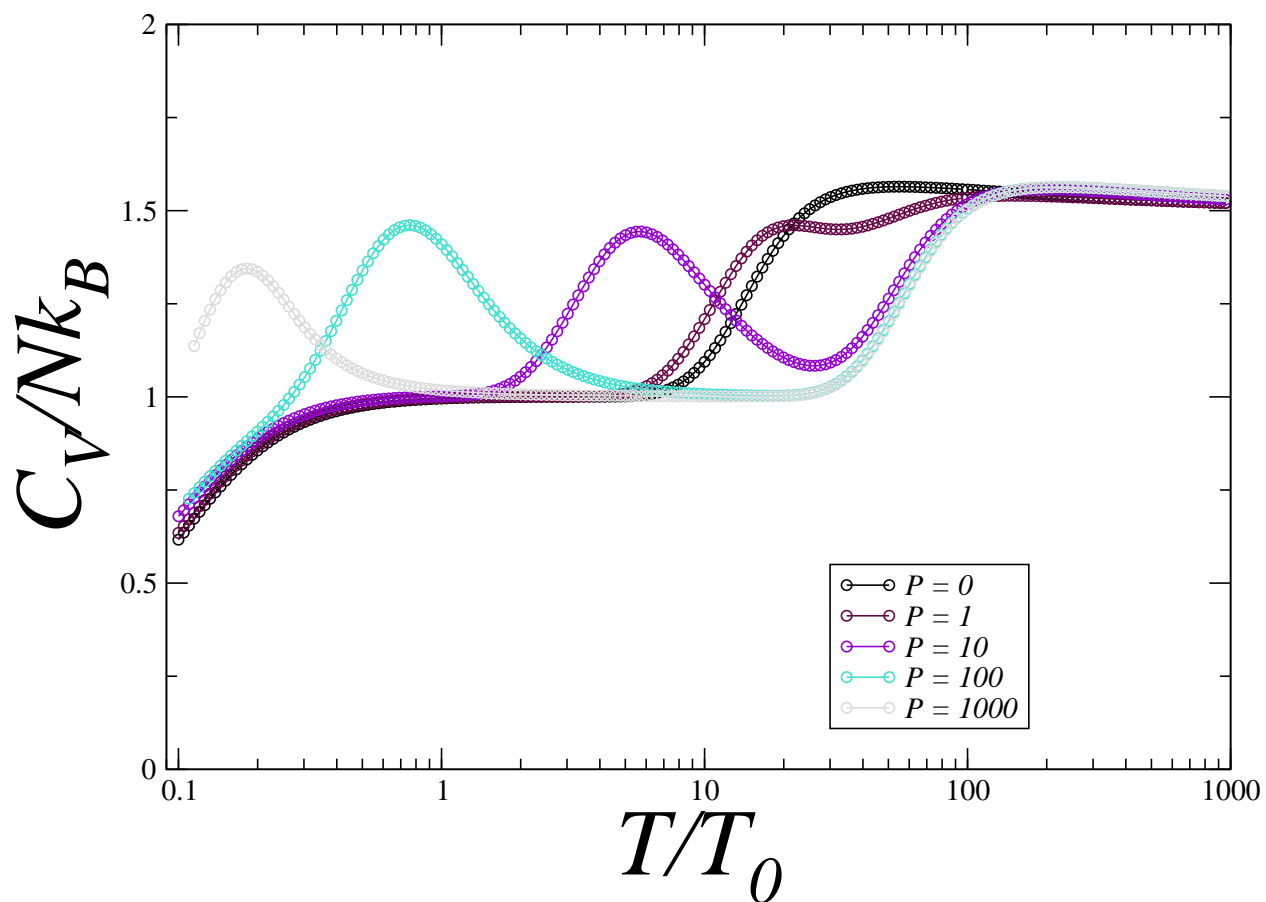


Figura 4.4: C_V / Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P .

$a = 0.1, 10 \text{ delta}$

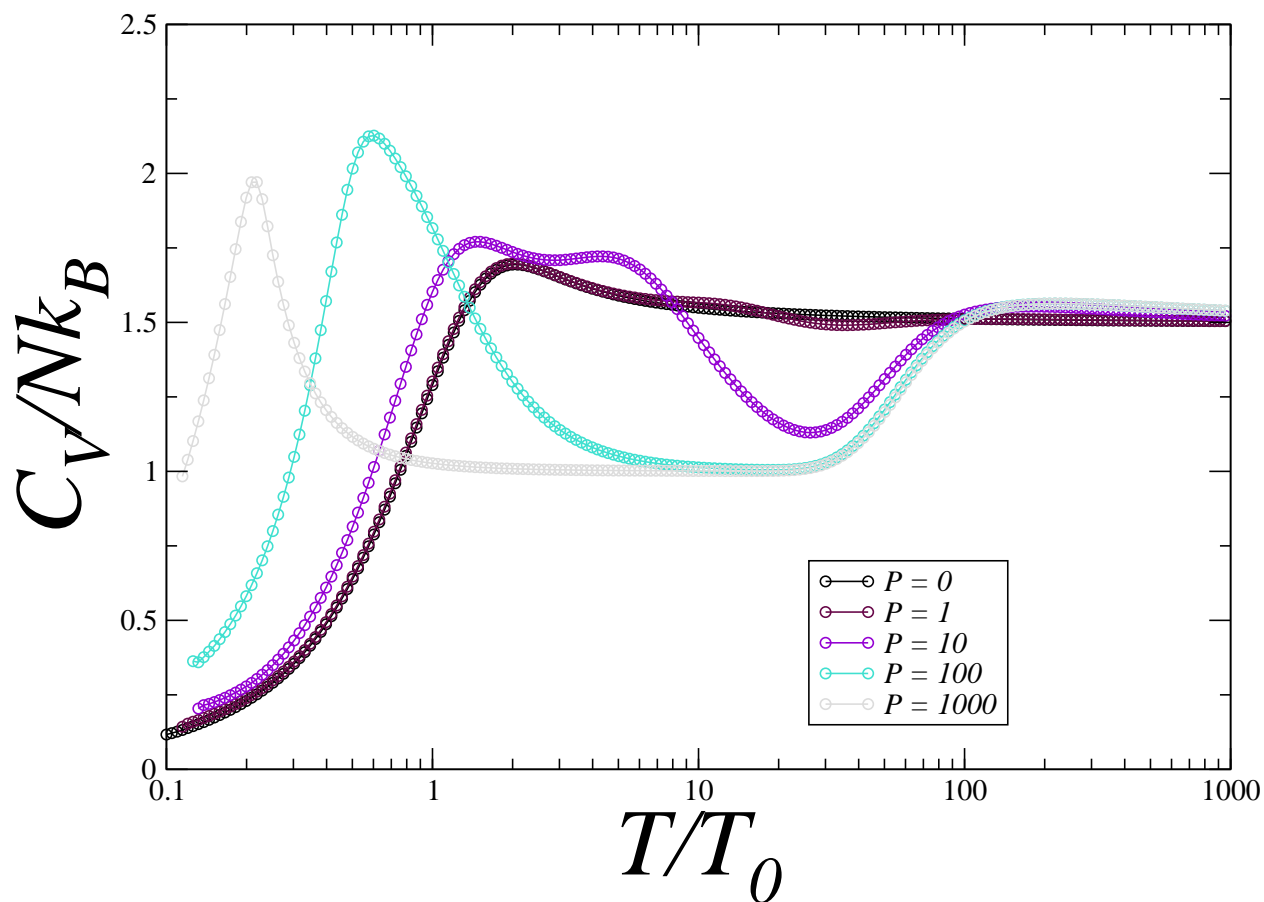


Figura 4.5: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 10 planos de impermeabilidad variable P .

$a = 0.1, 100 \text{ delta}$

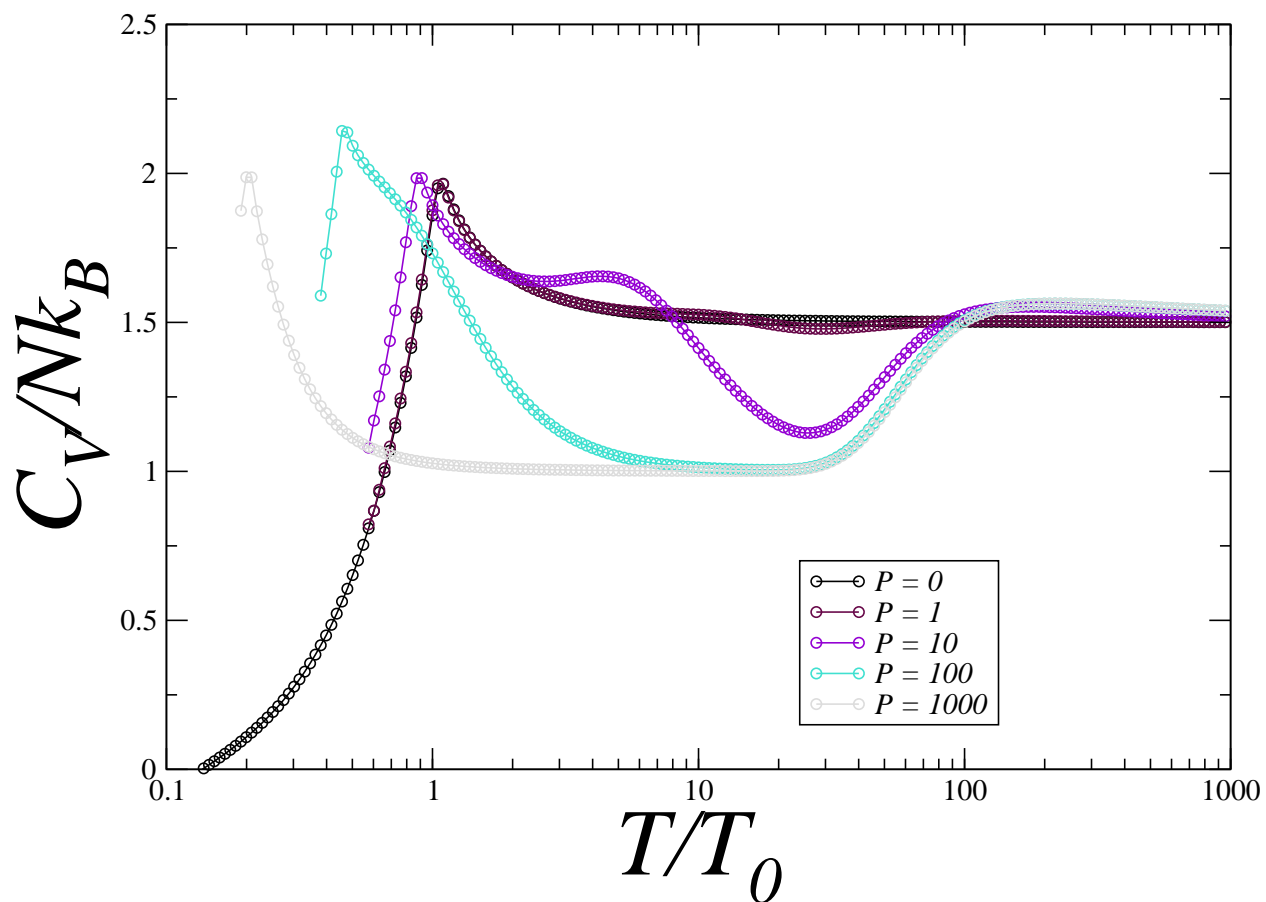


Figura 4.6: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 100 planos de impermeabilidad variable P .

$a = 0.1, 1000 \text{ delta}$

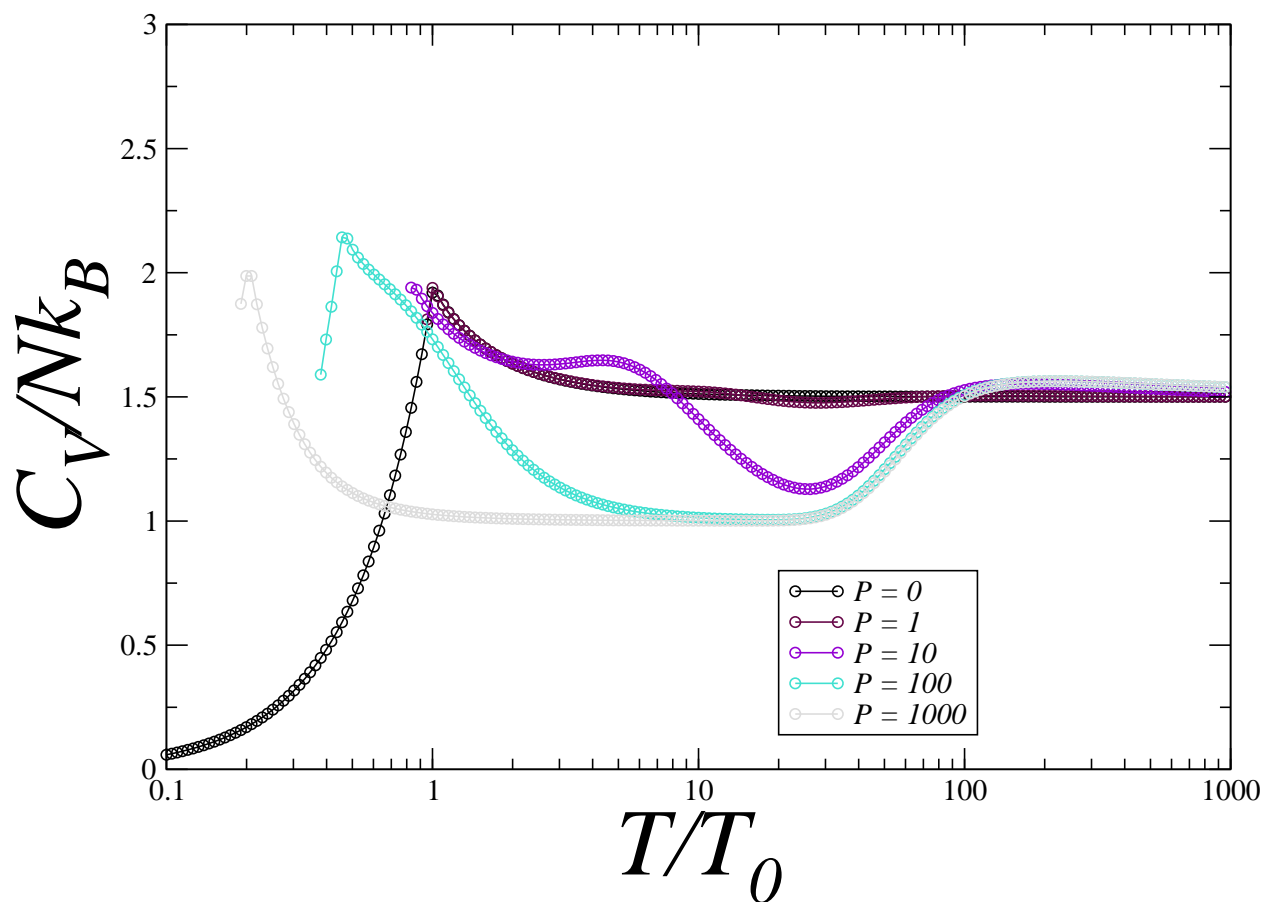


Figura 4.7: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$ y 1000 planos de impermeabilidad variable P .

$a = 1, 1 \text{ delta}$

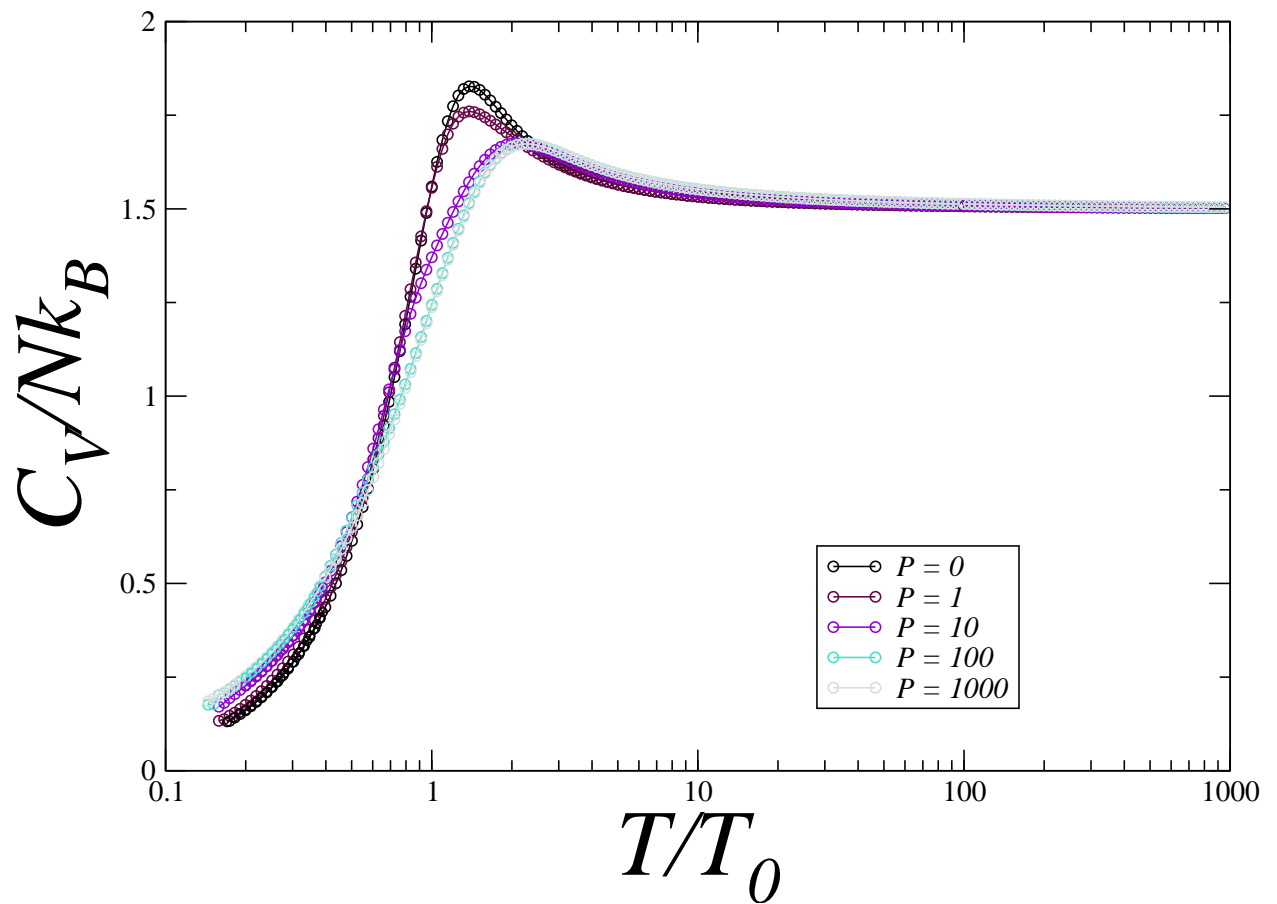


Figura 4.8: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P .

$a = 1, 100 \text{ deltas}$

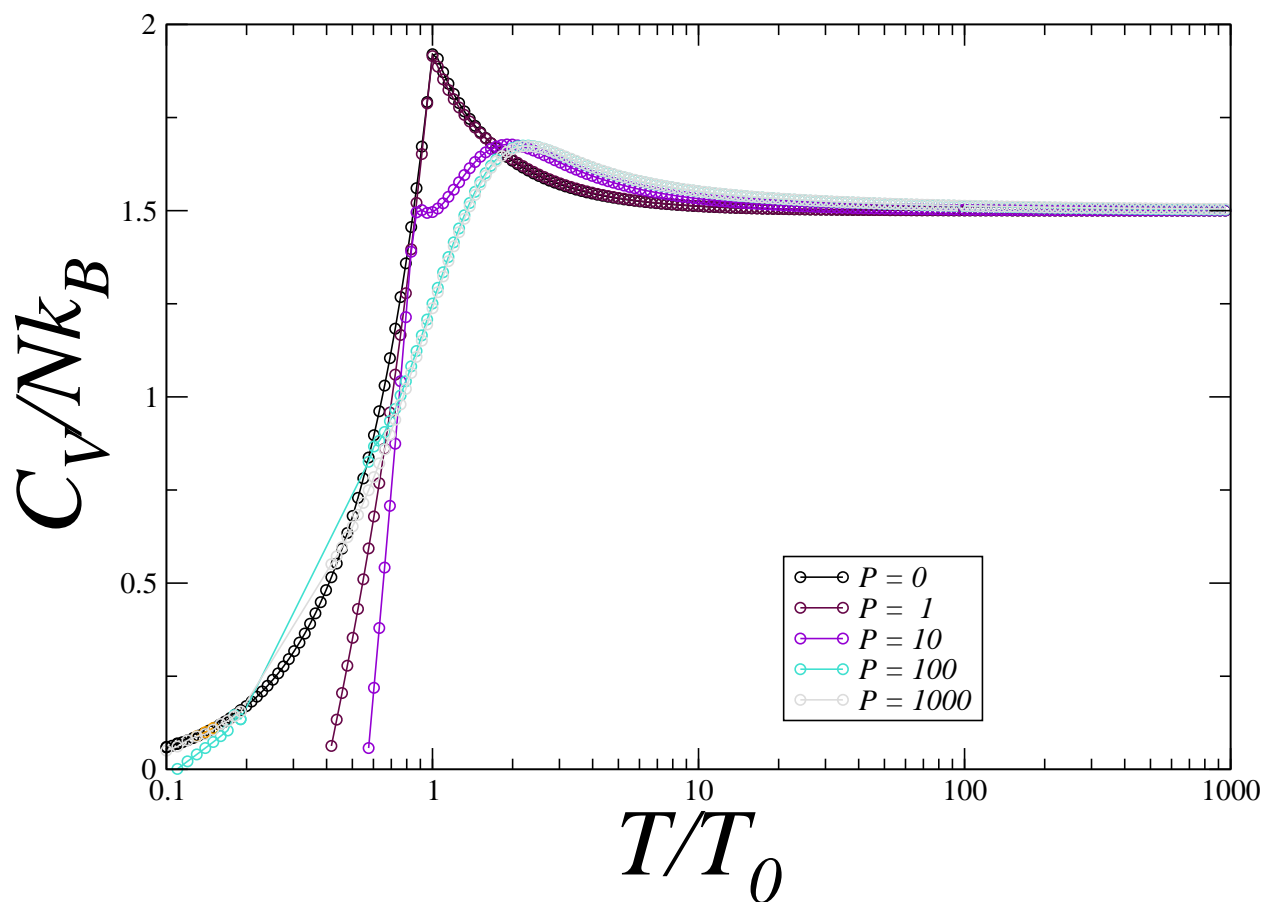


Figura 4.9: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y 100 planos de impermeabilidad variable P .

$a = 1, 1000 \text{ deltas}$

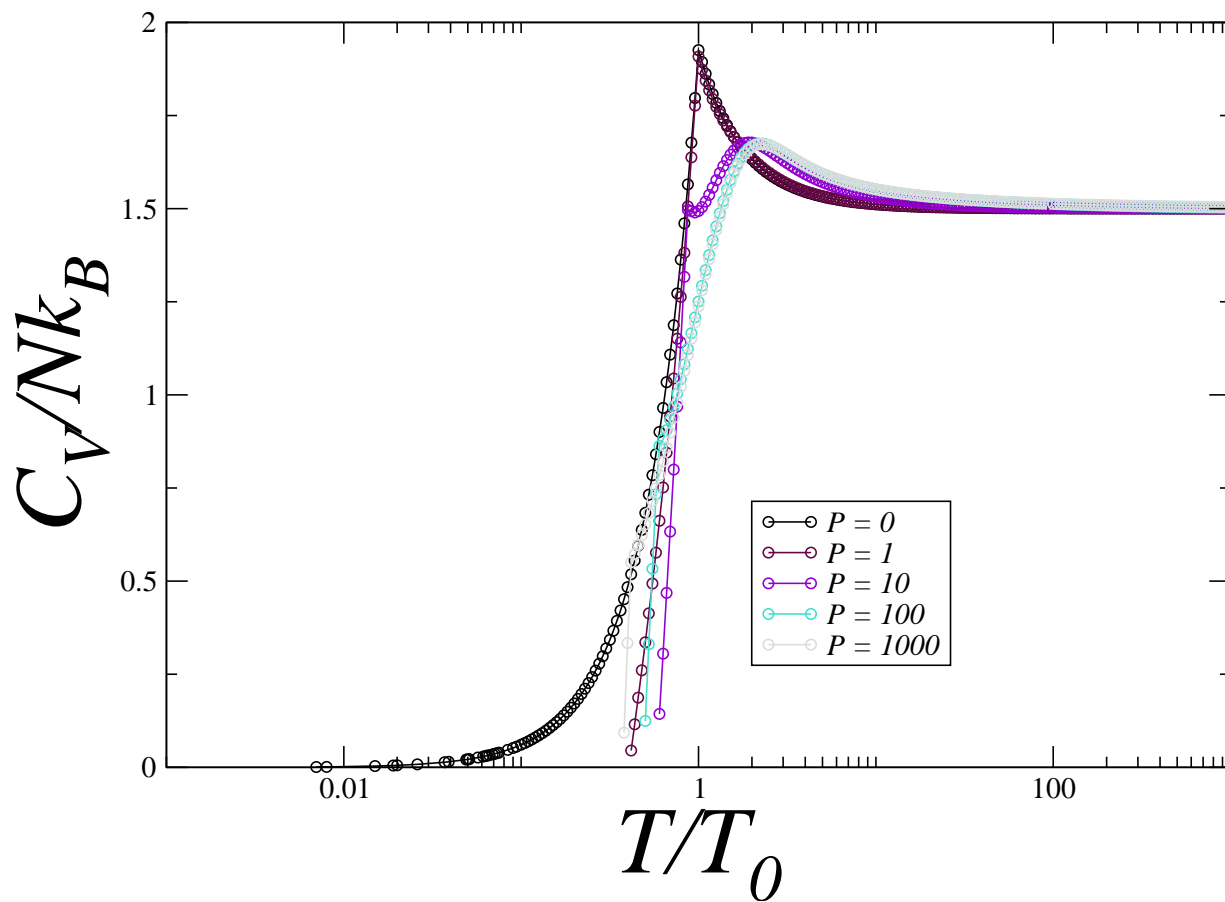


Figura 4.10: $C_V / N k_B$ vs T / T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (1)\lambda_0$ y 1000 planos de impermeabilidad variable P .

$a = 10, 1 \text{ delta}$

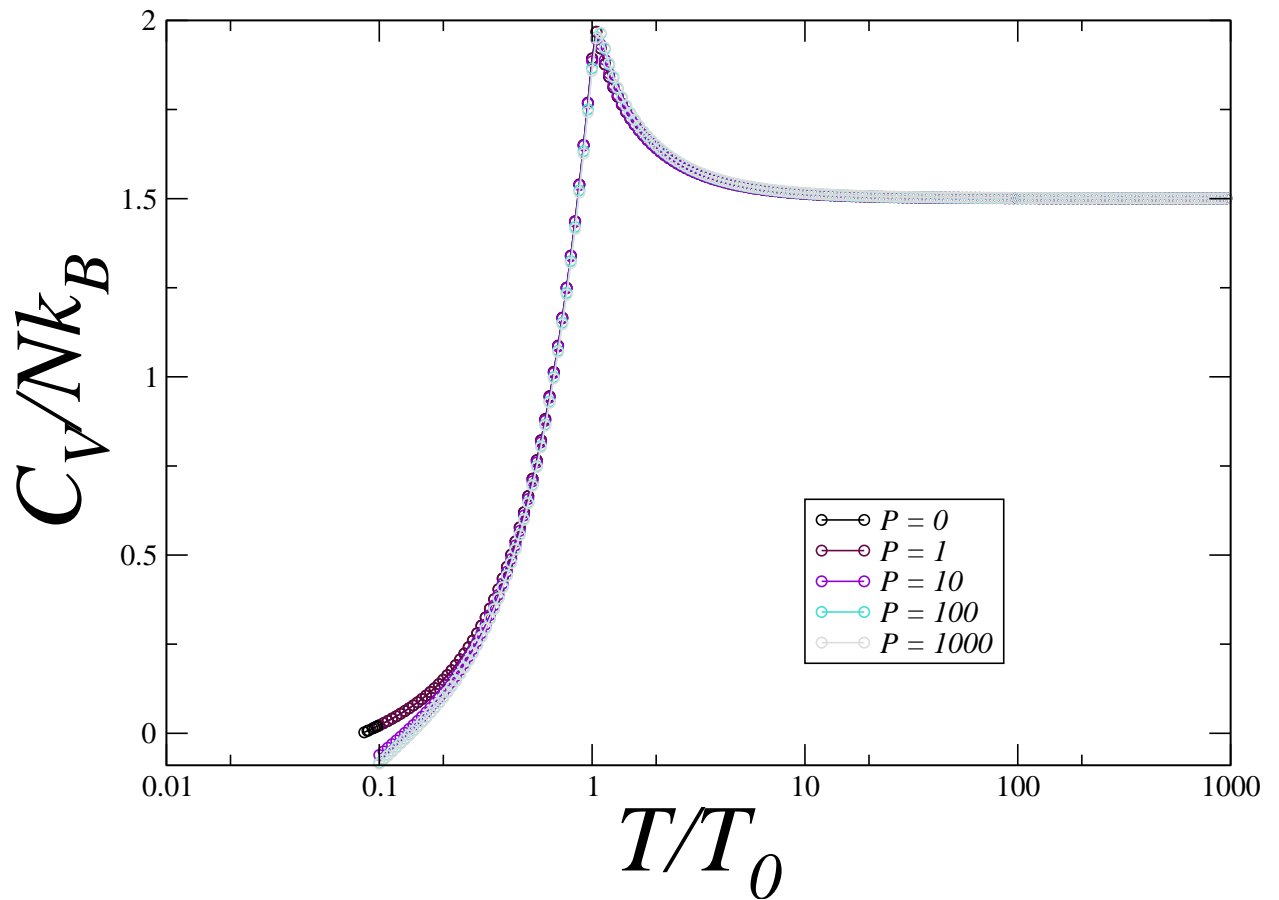


Figura 4.11: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (10)\lambda_0$ y un plano de impermeabilidad variable P .

$a = 10, 10 \text{ deltas}$

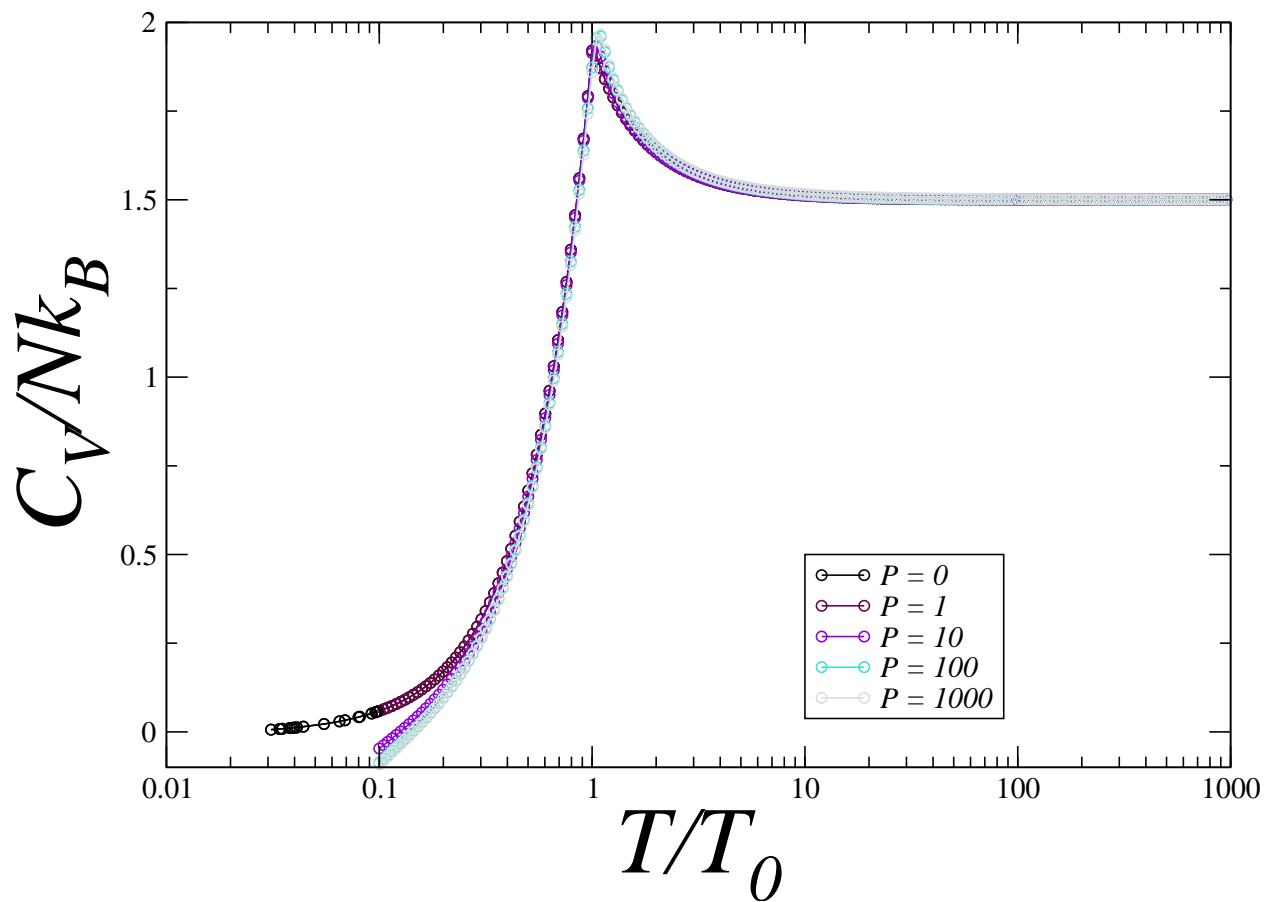


Figura 4.12: $C_V / N k_B$ vs T / T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (10)\lambda_0$ y 10 planos de impermeabilidad variable P .

Capítulo 5

Conclusiones

Los efectos de introducir un número \mathcal{M} de planos permeables, de anchura cero e igualmente espaciados, en una caja de anchura finita y extensiones laterales infinitas, son más notorios cuando la distancia interplanar $a = 0.1\lambda_0$ y el número de planos es pequeño; en el calor específico del gas ideal de bosones dentro de esta estructura aparece un mínimo y un máximo, además del máximo que siempre está presente y que ha sido extensivamente estudiado por Pathria y colaboradores, en el gas de bosones dentro de la caja semi-infinita sin planos divisorios.

La impermeabilidad de los \mathcal{M} planos divisorios, es una variable más cuyos valores extremos 0 e infinito, llevan al sistema desde una caja semi-infinita de ancho $(\mathcal{M} + 1)a$ hasta un conjunto de $\mathcal{M} + 1$ cajas independientes de ancho a , es decir, a dos sistemas de dos anchos diferentes. En ambos casos aparece sólo un máximo en el calor específico cuya posición está a una temperatura que satisface $\lambda^2 \simeq a^2/2$. Para valores intermedios de la impermeabilidad, como se dijo antes, aparecen un mínimo y un máximo además del ya existente.

Aumentar el número de deltas, dada una impermeabilidad finita, tiene el efecto de aumentar el ancho del sistema y hacer más pronunciado aquel máximo adicional (localizado a una temperatura menor del que describe Pathria), tendiendo a transformarse en un pico aún en el caso en que la separación a es menor que λ_0 .

Para un sistema donde la distancia entre los planos es $a = 0.1 \lambda_0$ con intensidad $P = 10$, se observa que para un plano tenemos que a temperaturas bajas el nivel de mínima energía del espectro discreto es el único que contribuye, además del espectro continuo en la otras dos direcciones, al calor específico de tal forma que estas contribuciones dan como resultado el caso en dos dimensiones. Conforme la temperatura aumenta, la contribución de los siguientes niveles dada la primera banda y la brecha entre ésta y la segunda banda, da como resultado la aparición de un máximo y un mínimo.

Eventualmente a temperaturas mayores los niveles consecutivos comienzan a contribuir y dan el comportamiento tridimensional de C_V . Si aumentamos el número de deltas a diez, lo que significa que agrandamos el sistema, es notorio que el C_V en la región de bajas temperaturas comienza a elevarse de tal forma que se hace un nuevo máximo, el máximo que ya teníamos se eleva también, quedando casi indistinguible excepto para $P < 100$, sin embargo el mínimo que se observa prevalece.

Podemos concluir que al aumentar el número de deltas de 1 a 10 hay una la transición de dimensión de dos a tres. Si incrementamos aún más el número de planos permeables a 100 o 1000, observamos que el levantamiento de C_V que generó el nuevo máximo se agudiza aún más de tal forma que parece tender al pico del caso de un número infinito de planos permeables con lo cual podemos concluir que conforme agrandamos el sistema al introducir planos permeables, es decir, en el límite termodinámico esperamos que este nuevo máximo se conviertan en cúspide. En este límite las curvas mostradas en la figura 5.1 coincidirán con las mostradas en [41], por supuesto, con los mismos parámetros.

Considerando nuevamente $a/\lambda_0 = 0.1$ con una delta, pero ahora hacemos variar la intensidad de la delta P , observamos que hay una transición de dimensión a mayor temperatura que en el caso anterior. Para el caso $P = 0$ ocurre a $T/T_0 \approx 10$ y para $P = 1000$ ocurre a $T/T_0 \approx 30$ donde podemos concluir que la transición de dimensión

ocurre aproximadamente a una temperatura T/T_0 que esta entre 10 y 30.

Si ahora la distancia entre deltas es $a = \lambda_0$, el comportamiento bidimensional desaparece y los máximos se corren hacia la temperatura crítica, $T/T_0 \approx 1$, ya que al aumentar la distancia, los niveles de energía se comienzan a concentrar de tal forma que es más fácil que los niveles próximos, al de mínima energía contribuyan al calor específico y eventualmente, si se hace más grande a , los máximos tienden a convertirse en picos.

Como se observa en la mayoría de las gráficas del calor específico, no mostramos datos para ciertos valores numéricos a temperaturas menores de $0.1 T_0$. Esto es debido a que al hacerse el cálculo de la fugacidad $\ln[1 - e^{-\beta(\varepsilon_{j_b, j_n} - \mu)}]$ para T/T_0 muy pequeñas, μ es casi igual a ε_0 , al grado de que la doble precisión en el lenguaje en “C” no distingue la diferencia y nos proporciona una divergencia computacional de tipo $\ln(0)$.

Es importante hacer notar las ventajas al estudiar planos permeables como deltas de Dirac en esta tesis y no otro tipo de barreras periódicas, como pueden ser barreras cuadradas o de funciones periódicas como el seno y el coseno. Las barreras deltas periódicas nos facilitan en gran medida los cálculos, evitando tener que resolver ya sea senos y cosenos hiperbólicos o resolver primero analíticamente la ecuación de Schrödinger antes de encontrar el espectro de energía. No obstante, no se descarta la posibilidad de extender a otros tipos de potenciales como el potencial armónico, que nos ayuden a entender mas sobre la condensación Bose-Einstein.

Para sistemas de bosones en tres dimensiones donde x y y son infinitas y z finita, confinada por \mathcal{M} planos permeables distanciados por la misma longitud a , no hay condensación Bose-Einstein la cual se puede deducir de la ecuación (4.14). Se observa un máximo que puede interpretarse como una aproximación a la condensación si se hace tender $z \rightarrow \infty$.

$$a = 0.1, P=10$$

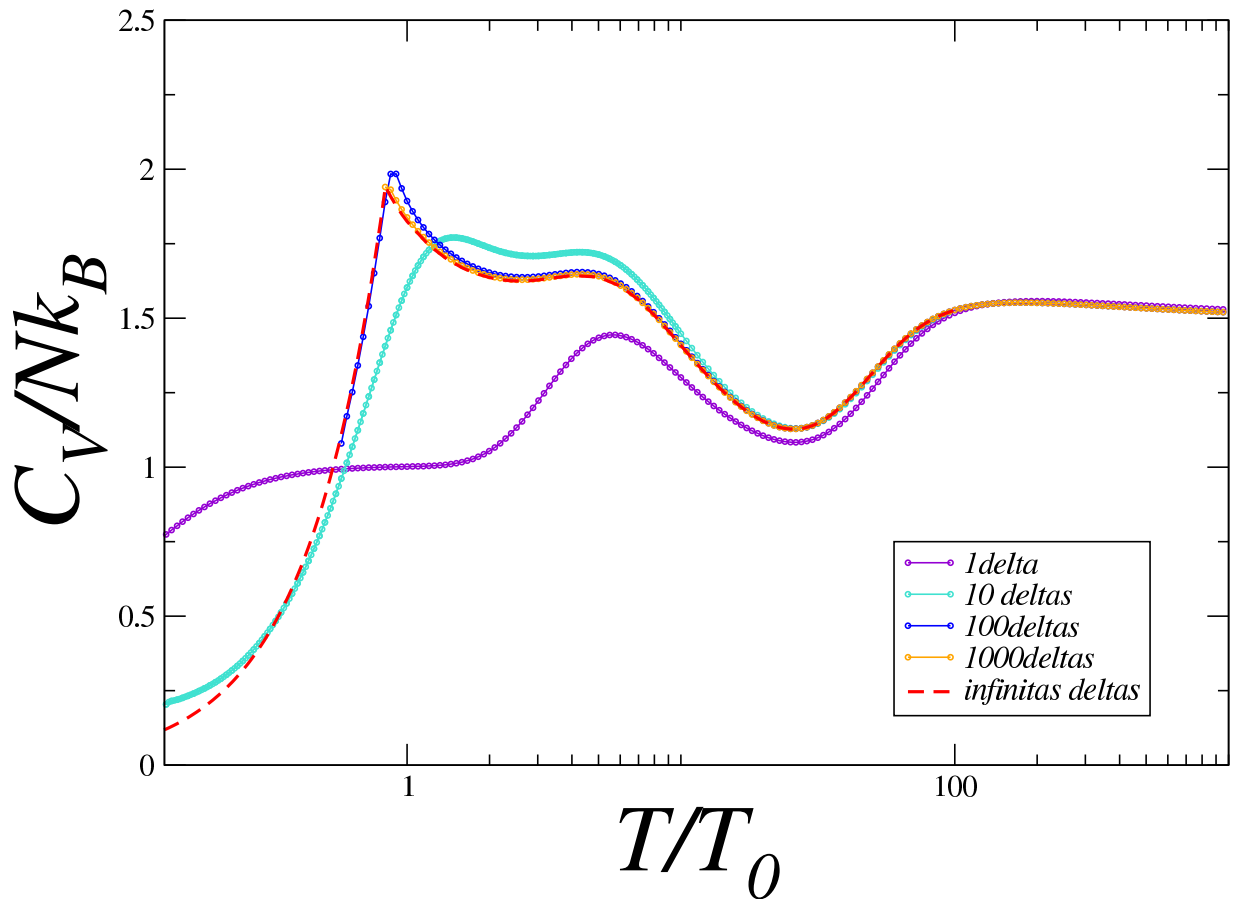


Figura 5.1: C_V/Nk_B vs T/T_0 para partículas en una caja de longitud $a = (0.1)\lambda_0$, intensidad del plano permeable $P = 10$ y número de planos permeables $\mathcal{M} = 1, 10, 100, 1000, \infty$.

Bibliografía

- [1] L. J. Challis, “Physics in less than three dimensions”, Contemporary Press, **33** (2), 111 (1992).
- [2] E. Corcoran, G. Zorpette, “Diminishing dimensions”, Scientific American, **263** (5), 74 (1990).
- [3] L. Jeroen, W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley y C. Dekker, “Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes”, Nature **391**, 1 (1998).
- [4] M. A. Kastner, “Artificial atoms”, Physics Today, **46** (1), 24 (1993).
- [5] P. Yam, “Dot’s incredible”, Scientific American **269** (5), 7 (1993).
- [6] M. A. Reed, “Quantum Dots”, Scientific American **268** (1), 118 (1993).
- [7] F. J. Owens, C. P. Poole, *The new superconductors*, (Plenum Press, N. Y., 1996.)
- [8] M. Bretz, J. G. Dash, D. C. Hickernell, E. O. McLea, O. E. Vilches, “Phases of He³ and He⁴ Monolayer Films Adsorbed on Basal-Plan Oriented Graphite”, Phys. Rev. A. **8**, 1589 (1973).
- [9] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, “Many-Body Physics with Ultracold gases”, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [10] C. Townsend, W. Ketterle y S. Stringari, “Bose-Einstein condensation”, Physics World, **10** (3), 29 (1997)

- [11] C. E. Wieman, “The Richtmyer Memorial Lecture: Bose-Einstein condensation in an Ultracold Gas”, *Am. J. Phys.* **64**, 847 (1996).
- [12] S. N. Bose, “Plancks Gesetz and Lichtquantenypothese”, *Zeitschrift für Physik*, **26**, 178-181 (1924).
- [13] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gas”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 261-267 (1924).
- [14] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gas 2”, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 3-14 (1925).
- [15] W. Pauli, “The connection Between Spin and Statistics” *Phys. Rev.* **58**, 716 (1940).
- [16] L. de la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, (Fondo de Cultura Económica, México, 1991).
- [17] L. V. Hau, S. E. Harris, Z. Dutton and C. H. Behroozi, “Light speed reduction to 17 meters per second in an ultracold atomic gas”, *Nature* **397**, 594 (1999).
- [18] F. London, “On Bose-Einstein condensation”, *Phys. Rev.* **54**, 947 (1938).
- [19] F. London, “The phenomen of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy”, *Nature* **141**, 643 (1938).
- [20] F. London, “On the Nature of the Superconducting State,” *Phys. Rev.* **51**, 678 (1937),
- [21] F. London, “Zur theorie mngnetischer felder im supreleiter”, *Physica* **3**, 450 (1936).
- [22] E. M. Lifshitz, “Superfluidity”, *Scientific American*, junio (1988).
- [23] P. Kapitza, “Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point”, *Nature* **141**, 74 (1938).

- [24] J. M. Blatt and K. W. Boer, “Bose-Einstein condensation of excitons”, Phys. Rev. **126**, 1691 (1962).
- [25] D. W. Snoke, J. P. Wolfe and A. Mysyrowicz, “Evidence for Bose-Einstein condensation of excitons in Cu_2O ”, Phys. Rev. B **41**, 11171 (1990).
- [26] J. L. Lin and J.P. Wolfe, “Bose-Einstein Condensation of Paraexcitons in Stressed Cu_2O ”, Phys. Rev. Lett. **71**, 1222 (1993).
- [27] A. V. Korolev, M. A. Liberman, “Bose condensation and superfluidity of excitons in a high magnetic field”, Phys. Rev. B **50**, 14077 (1994).
- [28] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, “Obsevation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor”, Science **269**, 198 (1995).
- [29] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett y R. G. Hulet, “Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Vapor”, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
- [30] K. B. Davis et al. “Bose- Einstein condensation in a gas of sodium atoms”, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [31] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible High T_c Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System”, Z, Phys. B **64**, 189 (1986).
- [32] C. W. Chu, P. H. Hor, R. L. Gao, Z. J. Huang y Y. Q. Wang, “Evidence for Superconductivity above 40K in the La-Ba-Cu-O Compound System”, Phys. Rev. Lett., **58**, 405 (1987).
- [33] J.-M. Triscone y O. Fischer, “Las superredes de superconductores”, Mundo Científico (La recherche) **135**, 13 (1992).
- [34] F. J. Sevilla, M. Grether, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, A. A. Valladares y O. Rojo, “Low dimensional BEC”, J. Low. Temp. Phys, **121**, 281 (2000).

- [35] R. K. Pathria, “Bose-Einstein Condensation in Thin Films”; Phys. Rev. A **5**, 1451 (1972).
- [36] S. Greenspoon y R. K. Pathria, “Comment On the specific heat of a Bose gas confined to a thin film geometry”, Phys. Rev. A **8**, 1657 (1973).
- [37] R. de L. Kronig, W. G. Penney, “ Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices”, Procc. R. Soc., (Lond.)A **130**, 499 (1931).
- [38] D. A. Mc Quarrie, “A Single Lecture Illustrating the Band Structure of Solids”, Chem. Educator **1**, 1 (1996).
- [39] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, N. Y., 1985.)
- [40] N. Ashcroft y D. Mermin, *Solid State Physics*, (HRW International Editions, N. Y., 1976.)
- [41] P. Salas, F. J. Sevilla, M. Fortes, M. de Llano, A. Camacho, and M. A. Solís, “Dimensional crossover of a boson gas in multilayers”, Phys. Rev. A **82**, 033632 (2010).
- [42] P. Salas, M. Fortes, M. de Llano, F. J. Sevilla & M. A. Solis, “Bose- Einstein condensation in multilayers”, Low Temp. Phys. **159** (5), 540 (2010).
- [43] S. Lang, *Linear Algebra*, 3rd ed., (New York, 1987, p. 241).
- [44] D.J. Griffiths y C.A. Steinkke, “Waves in locally periodic media”, Am. J. Phys. **69** (2), 137-154 (2001).
- [45] G. Arfken y H. Weber, “*Mathematical Methods foy Physicists*”, (Elsevier, Academic Press, 2005).
- [46] R. L. Burden y J. Douglas, *Análisis Numérico*, 9^a edición, (Ninth Edition, USA, 2011).
- [47] S. Greenspoon y R. K. Pathria, “Effects of Boundary Conditions on finite Bose-Einstein assemblies”, Phys. Rev. A **11**, 1080 (1975).

- [48] H.R. Pajkowski y R.K. Pathria, “Criteria for the onset of Bose-Einstein condensation in ideal systems confined to restricted geometries”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** (4), 561 (1977).
- [49] M.N. Barber y M.E. Fisher, “Specific Heat of an Ideal Boson Film of Finite Thickness”, *Phys. Rev. A* **8**, 1124 (1973).
- [50] Stephen Gasiorowicz, *Quantum Physics*, 3er. Ed., (John-Wiley, USA, 2003).
- [51] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*, second Edition, (John Wiley, N. Y. 1972).