



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00013

Matrícula: 207180057

"SOLUCIONES NUMERICAS A LA ECUACION DE GROSS-PITAEVSKII PARA SISTEMAS CONFINADOS: APLICACIONES A GUIAS DE ONDA DE MATERIA"

En México, D.F., se presentaron a las 12:00 horas del día 22 del mes de julio del año 2009 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. JOSE IGNACIO JIMENEZ MIER Y TERAN  
DR. REMIGIO CABRERA TRUJILLO  
DR. MOISES MARTINEZ MARES

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:


MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

DE: JOSE ALONSO LOPEZ MIRANDA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:


*Aprobar*

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta




JOSE ALONSO LOPEZ MIRANDA  
ALUMNO

REVISO




LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI  
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTORA DE LA DIVISIÓN DE CBI




DRA. VERONICA MEDINA BAÑUELOS

PRESIDENTE




DR. JOSE IGNACIO JIMENEZ MIER Y TERAN

VOCAL



DR. REMIGIO CABRERA TRUJILLO

SECRETARIO



DR. MOISES MARTINEZ MARES



Nombre  
Matrícula  
Correo

José Alonso López Miranda  
207180057  
astro\_pp@yahoo.com.mx



OTU : MANANA LA ENVIÁ.



***“Soluciones numéricas a la ecuación de Gross-Pitaevskii  
para sistemas confinados: aplicaciones a guías  
de onda de materia”***

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO  
DE MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)  
P R E S E N T A

**José Alonso López Miranda**

Julio del 2009.

X





**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
IZTAPALAPA**

**POSGRADO EN FÍSICA**

**SOLUCIONES NUMÉRICAS A LA ECUACIÓN DE  
GROSS-PITAEVSKII PARA SISTEMAS CONFINADOS:  
APLICACIONES A GUÍAS DE ONDA DE MATERIA.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS  
PRESENTA:**

**Fís. José Alonso López Miranda.**

Asesores:

Dr. Salvador Cruz Jiménez. UAM-Iztapalapa.

Dr. Remigio Cabrera Trujillo. ICF-UNAM.

México, D.F. Julio del 2009





# RESUMEN

A partir de los primeros Condensados de Bose-Einstein (CBE), en el año de 1997, producidos en gases alcalinos, la física de átomos ultra-fríos se ha enriquecido y con esto nuevas líneas de investigación han surgido. Esto a su vez ha generado la necesidad de una tecnología avanzada para poder estudiar a los átomos ultra-fríos que conforman al CBE. Tal es el caso del estudio de los **chips atómicos**. Estos *chips atómicos* pueden mejorar algunos dispositivos como relojes atómicos o construir aparatos más sofisticados, tales como separadores de haces o interferómetros de materia. De aquí nace el interés de estudiar los *chips atómicos* y que en esta Tesis se presenta un estudio amplio a través de los seis capítulos y tres apéndices que la conforman.

En el primer capítulo daremos los antecedentes de cómo se logró producir los primeros CBE de forma experimental. En el segundo capítulo estudiaremos la teoría formal del CBE partiendo de la estadística cuántica y mostrando la diferencia entre las estadísticas de *Fermi-Dirac* y *Bose-Einstein*. De esta última estadística, se dan las condiciones para que un gas de bosones a temperatura cero se observe el fenómeno de condensación. En el tercer capítulo veremos los componentes principales que dan forma al *chip atómico*, en donde campos magnéticos creados por alambres de micro-circuitos juegan un papel importante para enfriar, atrapar y guiar a los CBE en la superficie de los *chips atómicos*. De esta manera al ser guiados los átomos ultra fríos sobre estas guías de onda de materia, cierto número de átomos quedaran atrapados por los potenciales que forman dichas guías. La descripción teórica del CBE es mediante la ecuación de **Gross-Pitaevskii**; en el capítulo cuatro daremos su formulación partiendo de la teoría de campo promedio. También analizaremos el caso de la aproximación de **Thomas-Fermi** para la ecuación de *Gross-Pitaevskii*. En este contexto estudiaremos el caso de cuatro potenciales de atrapamiento, todo esto en una dimensión. De esta manera llegamos al capítulo cinco en donde presentamos el método numérico para resolver la ecuación de *Gross-Pitaevskii*, en el cual se implementa el método de Crank-Nicolson para la propagación en el tiempo de la ecuación de movimiento. A partir de esto se calcula el número de partículas o átomos atrapados.

Como consecuencia reportamos que la función de onda y la constante de acoplamiento no lineal  $g_{eff}$ , proveniente de la ecuación de *Gross-Pitaevskii*, es proporcional de la profundidad del potencial de “atrapamiento”  $V_0$  de la guía. Además, encontramos que la dependencia del número de átomos atrapados para la guía de onda tiene una ley de escalamiento general que depende de la profundidad del pozo ( $V_0$ ) y de la anchura ( $R_0$ ) de éste.



# AGRADECIMIENTOS

A mis asesores Dr. Remigio Cabrera Trujillo y Dr. Salvador Cruz Jiménez por la guía, enseñanza y apoyo moral que a lo largo de este tiempo me dieron.

A CONACyT por el apoyo de la beca otorgada a nivel maestría en la **UAM-I** con la que se pudo llevar a cabo este trabajo. Para la escritura de la tesis agradezco el apoyo de la UNAM a través de **PAPIIT-UNAM IN 107 108** y a **CONACyT-SNI** proyecto **89607**, así como al Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM por su hospitalidad durante los últimos meses que me permitieron concluir parte de este trabajo.



# Índice general

<b>1. Introducción.</b>	<b>11</b>
<b>2. Condensación de Bose-Einstein.</b>	<b>17</b>
2.1. Introducción . . . . .	17
2.2. Estadística cuántica. . . . .	17
2.3. Distribuciones cuánticas. . . . .	19
2.4. Estadística de Fermi-Dirac. . . . .	21
2.5. Estadística de Bose-Einstein. . . . .	22
2.6. Condensación de Bose-Einstein. . . . .	23
<b>3. Chips atómicos y guías de onda de materia.</b>	<b>29</b>
3.1. Introducción. . . . .	29
3.2. Estructura atómica de los átomos alcalinos. . . . .	30
3.3. Interacción magnética. . . . .	30
3.4. Guías de onda. . . . .	31
3.5. Chip Atómico. . . . .	36
<b>4. Ecuación de Gross-Pitaevskii.</b>	<b>39</b>
4.1. Introducción. . . . .	39
4.2. Formalismo de la ecuación de Gross-Pitaevskii . . . . .	40
4.3. Aproximación de Thomas-Fermi. . . . .	45
4.4. Potenciales de confinamiento en guías de onda de materia. . . . .	46
4.4.1. Guía con potencial cuadrado. . . . .	46
4.4.2. Guía con pozo triangular. . . . .	49
4.4.3. Guía con pozo armónico y doble armónico. . . . .	50
<b>5. Solución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii.</b>	<b>51</b>
5.1. Introducción. . . . .	51
5.2. Descripción del Método de Diferencias Finitas. . . . .	52
5.2.1. Derivadas parciales y temporales. . . . .	53
5.2.2. Integrales en diferencias finitas. . . . .	55
5.3. Ecuación de Schrödinger lineal con MDF. . . . .	55
5.3.1. Caso I. Independiente del tiempo. . . . .	55
5.3.2. Caso II. Dependiente del tiempo. . . . .	57

5.3.3. Ecuación de Schrödinger con tiempo-imaginario. . . . .	58
5.4. Método de Crank-Nicolson. . . . .	59
5.5. propagación de un paquete Gaussiano. . . . .	61
5.6. Potenciales de confinamiento en guías de onda de materia. . . . .	65
5.7. Resultados. . . . .	68
5.7.1. Potencial cuadrado. . . . .	68
5.7.2. Potencial triangular. . . . .	69
5.7.3. Potencial armónico y doble armónico. . . . .	70
<b>6. Conclusiones.</b>	<b>75</b>
<b>A. Transmisión y reflexión de una partícula: código en F90.</b>	<b>79</b>
<b>B. Evolución de la ecuación de Gross-Pitaevskii: código en F90.</b>	<b>85</b>
<b>Bibliografía.</b>	<b>85</b>
<b>Índice alfabético</b>	<b>96</b>

# Índice de figuras

1.1.	Efecto de condensación y función de onda materia grande. . . . .	12
1.2.	Condensado de Bose-Einstein producida por átomos de rubidio. . . . .	13
1.3.	Trampa magneto-óptica. . . . .	14
2.1.	Fracción de número de partículas en la estadística de Bose-Einstein . . . . .	27
3.1.	Trampas tipo <i>strong field seeking</i> y <i>weak field seeking</i> . . . . .	32
3.2.	Diseño básico de una trampa magnética tipo <i>side guide</i> . . . . .	32
3.3.	Esquema de un Chip atómico. . . . .	33
3.4.	Líneas de campo para diferentes configuraciones de guías de onda. . . . .	34
3.5.	Trampas magnéticas en forma de U y Z. . . . .	35
3.6.	Trampas magnéticas en forma de Y. . . . .	35
3.7.	Trampas magnéticas en forma de X. . . . .	36
3.8.	Chip atómico con una trampa magnética en U. . . . .	37
3.9.	Chip atómico. . . . .	37
4.1.	Potencial cuadrado. . . . .	46
4.2.	Potencial triangular. . . . .	48
4.3.	Potenciales: armónico y doble armónico. . . . .	49
5.1.	Red numérica. . . . .	53
5.2.	Transmisión de una partícula en un pozo. . . . .	64
5.3.	Reflexión de una partícula en un pozo. . . . .	65
5.4.	Dispersión de un paquete de onda gaussiano en un pozo. . . . .	66
5.5.	Grafica del número máximo de átomos, $N_{max}$ , atrapados de los cuatro potenciales con el MDF usando la aproximación de TF. . . . .	69
5.6.	Grafica del número máximo de átomos, $N_{max}$ , atrapados por el potencial cuadrado con varias longitudes $R_0$ y profundidad $V_0$ para un gas débilmente interactuando. . . . .	70
5.7.	Función de onda de materia en la trampa en la aproximación de TF. . . . .	71
5.8.	Función de onda de materia con el MDF. . . . .	72





# Capítulo 1

## Introducción.

Existen dos tipos de partículas elementales en la naturaleza: los fermiones y los bosones. Éstas partículas constituyen dos grandes familias, cuyas características marcan diferencias fundamentales en la estructura y comportamiento de la materia. La diferencia entre ellos se encuentra en el valor de su momento angular intrínseco de espín que es semientero para los fermiones y entero para los bosones. Como ejemplos de fermiones, tenemos a los electrones, protones y neutrones. Por otro lado, como ejemplo de bosones están los fotones, mesones y cualquier núcleo con espín entero. Los fermiones cumplen con el principio de exclusión de Pauli a diferencia de los bosones que no lo obedecen. El principio de exclusión de Pauli establece que dos fermiones no pueden ocupar un estado con los mismos números cuánticos, por lo que un sistema de fermiones deberá mantener un orden en la ocupación de estados de acuerdo a este principio. Por otra parte, los bosones, no requieren satisfacer este principio, por lo que el mismo estado puede ser ocupado por cualquier número de bosones. Los átomos están constituidos por electrones, protones y neutrones, que son fermiones, por lo que el llenado de los diferentes niveles de energía, tanto electrónicos como nucleares sigue rigurosamente al principio de exclusión de Pauli. Sin embargo, aún en este caso, basta que el número total de fermiones sea par para que el sistema se comporte como bosónico.

Consideremos un gas formado de bosones, al cual podemos limitar espacialmente por algún mecanismo, de manera que cada uno de ellos se comporta como una partícula cuya energía cinética dentro de la región de confinamiento sólo pueda tomar valores discretos, como lo establece la mecánica cuántica para estados estacionarios. A temperatura ambiente, los átomos tendrán energías cinéticas relativamente altas y conforme se reduce la temperatura su velocidad disminuye, ocupando estados de energía cinética más baja. Cerca del cero absoluto comienzan a agregarse, en otras palabras comienza el sistema a condensarse (ver figura 1.1). Conforme el gas de átomos bosónicos se enfría su longitud de onda de de Broglie se incrementa. Puesto que la longitud de onda de de Broglie es  $\lambda_{dB} = h/p$ , con  $p$  el ímpetu del átomo y la energía promedio de la partícula  $\frac{p^2}{2m} = \kappa_B T$ , donde  $m$  es la masa de partícula,  $\kappa_B$  es la constante de Boltzmann y  $h$  es la constante de Planck, entonces se tiene que  $\lambda_{dB}$  es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura,  $\lambda_{dB} \propto T^{-1/2}$ . Cuando la longitud de onda de de Broglie es mayor que la distancia promedio entre átomos,  $d$ , es decir  $\lambda_{dB} > d$ , los átomos no se pueden distinguir el uno de otro debido a que la función de onda o paquete de onda de cada átomo se

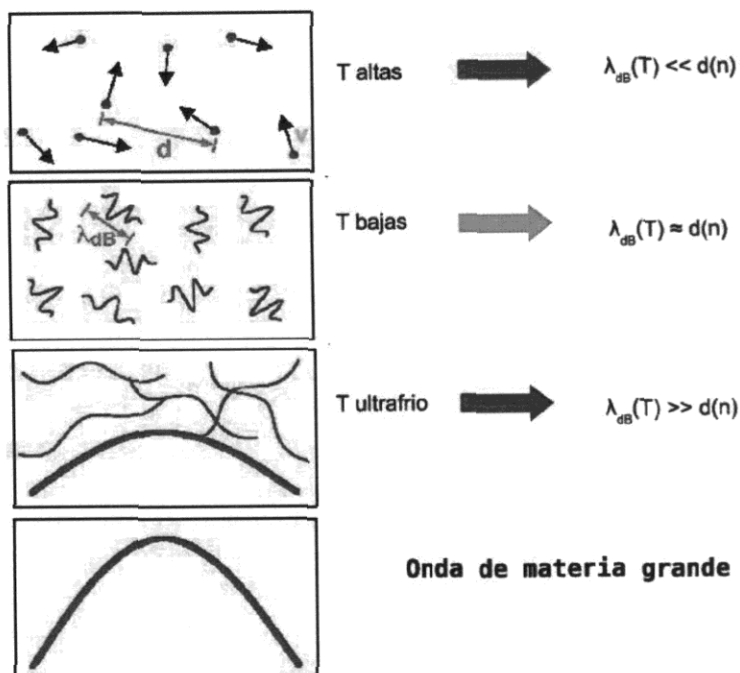


Figura 1.1: Esquema que muestra la dependencia de la longitud de onda de de Broglie con la temperatura. A temperaturas altas las partículas tienen mayor energía cinética y la distancia de separación entre átomos  $d$  es mayor a  $\lambda_{dB}$ . Al bajar la temperatura a ordenes de  $10^{-6}$  Kelvin,  $\lambda_{dB}$  es igual a  $d$ . Cuando  $T$  es muy baja cerca del cero absoluto, aproximadamente  $10^{-9}$  Kelvin, la longitud de onda de de Broglie  $\lambda_{dB}$  es mucho mayor que  $d$ . La función de onda de cada partícula se superponen formando una onda de materia grande y da origen a efectos puramente cuánticos [1].

sobreponen formando así una función de onda macroscópica. Cuando esto ocurre, se dice que se ha alcanzado una condensación o cambio de fase de un gas clásico a un gas cuántico.

Debido a este proceso de condensación, cada bosón empieza a ocupar el mismo nivel de energía. Esto significa que los átomos se apilan espacialmente perdiendo su identidad individual. Siendo indistinguibles entre sí, los átomos llegan a formar una nube de gas difusa o mejor dicho se tiene una onda de materia y se comportan como un "super-átomo". A esta nube difusa de átomos ultra-fríos se le conoce como condensado de Bose-Einstein (CBE) [2, 3].

Nuevas líneas de investigación [4, 5, 6, 7] han surgido desde que se crearon los primeros Condensados de Bose-Einstein [8, 9] en el año de 1995 (ver figura 1.2). Desde entonces la física se ha enriquecido, particularmente en áreas como óptica de átomos, física atómica y materia condensada. Este campo ha inducido en forma considerable el surgimiento de grupos de investigación a nivel mundial [10]. Es el caso de la física de átomos ultra-fríos, que es un campo de la física moderna que se ha venido desarrollando en los últimos 25 años, tal ha sido

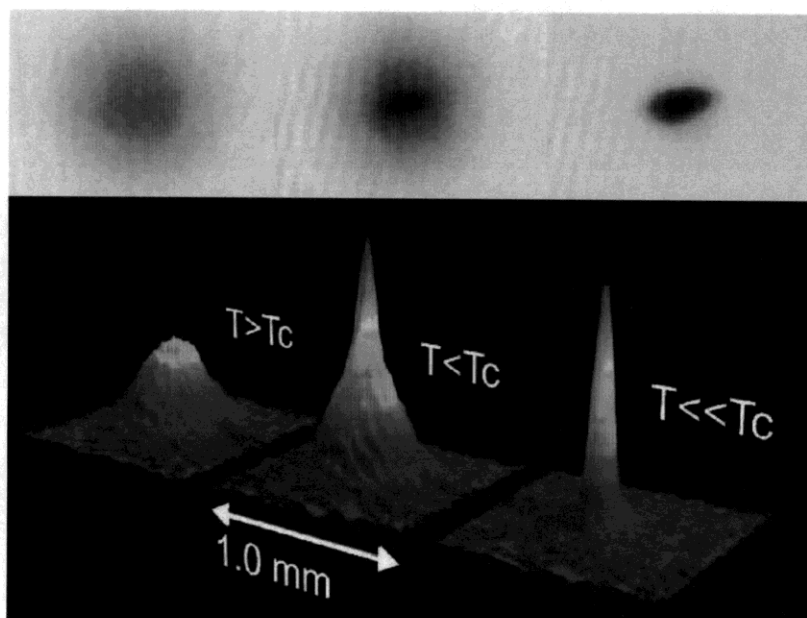


Figura 1.2: Fotografía de uno de los primeros condensados de Bose-Einstein obtenido por el grupo de *Center for Ultracold Atoms*, en el Massachusetts Institute of Technology. La secuencia muestra el crecimiento de la densidad de átomos. La parte superior se ve la nube difusa del “Super-átomo” [4].

el impacto en el mundo de la ciencia que se han otorgado dos premios Nobel en esta rama de la física. Uno en el año de 1997 por enfriamiento de átomos mediante láseres [11, 12, 13] y en el año 2001 por los primeros condensados de Bose-Einstein hechos con átomos de rubidio y sodio [4, 14].

El enfriamiento láser se basa en el hecho de considerar la absorción y emisión de luz láser (fotones) por los átomos, y el principio básico es que los átomos y fotones intercambian energía. Uno podría pensar que el efecto de la incidencia de luz sobre los átomos del gas tendría como consecuencia incrementar su temperatura. Sin embargo, el truco consiste en conseguir que en promedio la energía de los fotones emitidos por cada átomo sea mayor que la energía con la que incidieron. Si se consigue que los átomos absorban la luz del láser solo proviniendo de una dirección, y emitiendo en cualquier otra, entonces el resultado neto es que el átomo pierde velocidad en la dirección en la que se movía originalmente. De esta forma la velocidad se reduce y por lo tanto la temperatura del gas disminuye después de que muchos de estos procesos ocurren [11, 12]. Si se logra que una buena fracción de átomos absorba totalmente a los fotones provenientes de las fuentes, la transferencia de ímpetu fotón-átomo será máxima y por tanto esa componente de velocidad se reducirá, lográndose un primer paso de enfriamiento del átomo.

Sabemos que un átomo en reposo absorberá completamente a un fotón cuando la energía de éste corresponda a la diferencia entre niveles electrónicos, es decir  $h\nu = E_2 - E_1$  donde  $\nu$

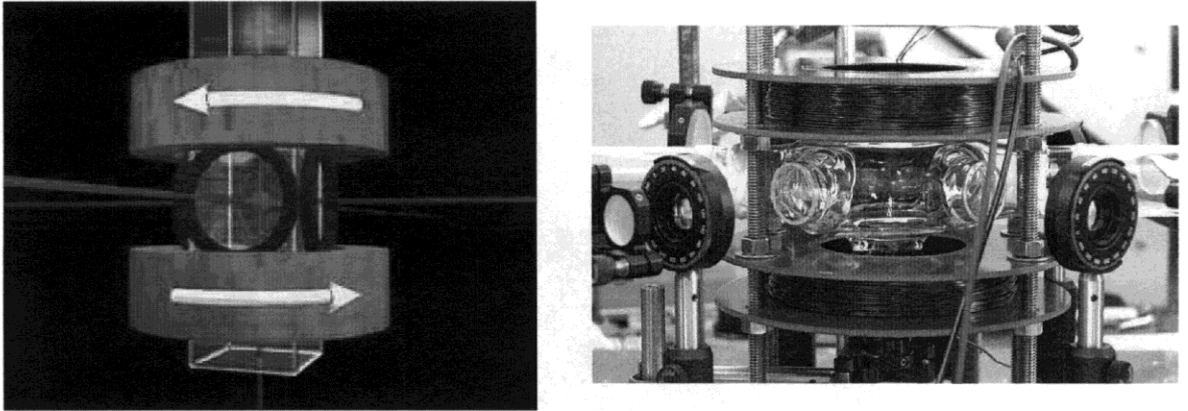


Figura 1.3: La figura de la izquierda muestra el esquema en donde seis láseres apuntan hacia el centro de la caja donde se encuentra el gas de bosones (enfriamiento láser en tres dimensiones). La fotografía de la derecha es una trampa magnética que sirve para contener a los átomos fríos. El sistema de láseres y la trampa magnética forman en su conjunto una trampa magneto-óptica (MOT) [9].

es la frecuencia asociada al fotón. Sin embargo, si el átomo tiene una componente de velocidad hacia la fuente, debido al efecto Doppler, se debe ajustar la frecuencia de la radiación láser ligeramente por debajo de la frecuencia de absorción atómica en reposo. Al absorber el fotón, por conservación del impetú, este se desacelerará. De esta manera se garantiza la absorción eficiente del fotón y el consecuente enfriamiento del átomo. A este proceso se le conoce como *enfriamiento Doppler*. La repetición de este proceso en el tiempo lleva al equivalente de una fuerza de frenado similar a una fuerza de fricción. Al disponer un par de haces láser para cada una de las tres direcciones del espacio, se obtiene una “melaza óptica” que frena a los átomos. Así la luz láser permite frenar y enfriar los átomos. Es necesario mantener los átomos fríos por tiempo suficiente en el mismo lugar. Para alargar el tiempo de confinamiento de los átomos se usan trampas magnéticas. La idea es añadir a la melaza óptica un campo magnético no homogéneo. El efecto de este campo es desplazar los niveles de energía atómicos (efecto Zeeman) que permiten a su vez modificar la absorción de fotones del láser por los átomos. La luz láser se encuentra en resonancia con el átomo en diferentes lugares debido a la presencia del campo magnético. Esto da lugar a que los átomos experimenten una fuerza de confinamiento que tiende a mantenerlos en el centro de la melaza óptica. Con estas trampas magneto-ópticas (MOT por sus siglas en inglés, ver figura 1.3) se logra confinar cerca de diez millones de átomos hasta por un tiempo de varios minutos. Las temperaturas que se pueden alcanzar son de  $\sim 10^{-4}K$ .

En experimentos llevados entre 1987-1988 pusieron de manifiesto que las temperaturas alcanzadas podrían ser aún más bajas que el límite teórico del enfriamiento Doppler mediante otros mecanismos de enfriamiento. Sin entrar en detalles, es posible dar una idea simple de uno de ellos llamado enfriamiento *Sísifo*. Este método involucra el análisis de la interacción de los láseres con los diferentes subniveles magnéticos de los estados excitado y base del átomo. En la práctica, como la teoría, ponen de manifiesto que el nivel de energía de un átomo sujeto a

una onda luminosa depende de la intensidad, la polarización y la frecuencia de la onda (estos desplazamientos de energía resultan de la interacción entre el dipolo eléctrico del átomo y el campo electromagnético de la onda). En la versión unidimensional del enfriamiento Sísifo, los átomos se mueven en el campo resultante de la superposición de dos láseres con polarizaciones lineales perpendiculares entre sí y que viajan en direcciones opuestas. La superposición de las ondas genera un gradiente de polarización, que modula espacialmente la energía de los subniveles magnéticos del átomo. Esta modulación actúa como un potencial sinusoidal para el movimiento traslacional de los átomos, denominado potencial óptico. A medida que los átomos se mueven en el campo electromagnético del láser, sufren variaciones de su energía interna que son compensadas por variaciones en su energía traslacional. El efecto de enfriamiento se produce porque la interacción con el láser tiende a mantener los átomos en el estado de más baja energía, de modo que cuando alcanza una cima del potencial, el láser induce una transición a un pozo de potencial correspondiente al otro subnivel magnético. En su movimiento los átomos se ven obligados constantemente a escalar cimas de potencial a costa de su energía cinética y van disminuyendo su velocidad. El mecanismo de enfriamiento recibió el nombre de enfriamiento Sísifo en alusión al rey griego condenado por toda la eternidad a subir una roca por una colina para dejarla caer y recomenzar sucesivamente. El enfriamiento Sísifo permite alcanzar temperaturas alrededor de dos ordenes de magnitud más bajas que el enfriamiento Doppler, *i.e.* del orden del microkelvin ( $10^{-6}K$ ).

Esta temperatura es muy caliente para que se forme un CBE; sin embargo, una forma de descender por debajo de esta temperatura es mediante el enfriamiento evaporativo, método propuesto en 1988 [15]. En esta técnica no se trata de controlar la velocidad de los átomos haciéndolos absorber o emitir fotones. Al contrario, se trata hasta cierto punto, de dejar intactos los átomos inmóviles. Se elige una frecuencia de transición atómica y una configuración de haces láser en el que el átomo deja de interactuar con la luz puesto que su velocidad es nula, dando como resultado que los átomos inmóviles siguen siendo inmóviles, mientras que otros se incorporan a este estado adquiriendo una velocidad nula en un momento dado. El número de átomos inmóviles aumenta así poco a poco. En teoría, el enfriamiento evaporativo permite (después del enfriamiento previo por efectos Doppler y Sísifo) alcanzar una temperatura tan baja como se quiera. En la práctica, se alcanza temperaturas de nanokelvin. Este mecanismo es equivalente al del enfriamiento de una taza de café. Al soplar sobre la taza, uno hace el efecto del barrido de frecuencias y esto hace que los átomos más calientes se alejen de la taza, dejando en el fondo de la taza los más fríos. De ahí el nombre de enfriamiento evaporativo.

Una vez creado el condensado, lo interesante es manipularlo. En la actualidad, se sabe también que al ponerlos en dos trayectorias diferentes y hacerlas sobreponerse producen patrones de interferencia [16, 17, 18]. También se están construyendo láseres a base de condensados de Bose-Einstein donde es posible crear fuentes capaces de producir haces intensos, direccionales y coherentes de átomos ultra-fríos que tengan la misma longitud de onda, esto se debe a que un condensado puede tener muchos átomos en el mismo estado base y de aquí, tener la misma energía y longitud de onda. A este tipo de láseres se les conoce como *láser de átomos* [9, 19].

Existen otras aplicaciones en donde los condensados son muy útiles e interesantes como los relojes atómicos y los *chips atómicos* [20, 21, 22, 23] que se empezaron a desarrollar a principios del año 2000 [24]. Estos chips usan campos magnéticos creados por alambres de micro-circuito

para atrapar, enfriar y guiar átomos sobre la superficie del chip [25, 26, 27]. Así los alambres en superficies de micro-chips (guías de onda de materia [16]) crean las microtrampas en donde se pueden guiar los átomos ultra-frios (condensados de Bose-Einstein).

Considerando que se trata en un problema de física de frontera, nace el interés de estudiar guías de onda en chips atómicos. Además por su relevancia en aplicaciones tecnológicas en México se cuenta con pocos grupos que estudian este campo de la física de átomos ultra-fríos, en especial los chips atómicos. Siendo un campo de investigación nuevo, poco se ha hecho de manera teórica sobre los átomos atrapados en una guía de onda de materia que pueden tener geometrías diferentes, como curvas [28, 29] o rectilíneas.

El propósito de esta tesis es estudiar el transporte y número de partículas atrapadas de un condensado de Bose-Einstein a través de una guía de onda unidimensional, vista como una aproximación a un canal de chip atómico. Así mismo, se desarrollan las técnicas numéricas para la solución de la ecuación de Schrödinger no-lineal (ecuación de Gross-Pitaevskii) correspondiente. Para darle consistencia a esta tesis trataremos en el capítulo 2 sobre la estadística de Bose-Einstein y las condiciones físicas para que se presente el fenómeno de condensación. En el capítulo 3 daremos una breve descripción sobre las guías de onda de materia y los chips atómicos. El formalismo teórico para describir el condensado se estudiará en el capítulo 4 mediante la ecuación de Gross-Pitaevskii. En el capítulo 5 se desarrolla la técnica numérica empleada en este trabajo, basada en diferencias finitas para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii. Cabe mencionar que trataremos únicamente el caso unidimensional en este trabajo. En el capítulo 6 presentaremos nuestros resultados y conclusiones. Por último se cuenta con tres apéndices donde dos de ellos presentan el código escrito en FORTRAN 95 el que se implementa en el capítulo 5 para los cálculos numéricos, y el tercer apéndice consiste en un artículo que aparecerá como parte de la memoria del XXIX INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHENOMENA IN IONIZED GASES celebrada en Cancún en el mes de julio del 2009 y resume los capítulos 4, 5 y 6.

# Capítulo 2

## Condensación de Bose-Einstein.

### 2.1. Introducción

En el año de 1995 Carl Wieman y Eric Cornell de la Universidad de Colorado y Wolfgang Ketterle del Massachusetts Institute of Technology obtuvieron el primer condensado de Bose-Einstein para un gas atómico diluído [8, 9]. Como se indicó en la introducción, la condensación de Bose-Einstein es un fenómeno que se presenta en la mecánica estadística cuántica. Cuando se baja la temperatura a escala de  $10^{-9}\text{K}$  las partículas contenidas dentro de un recipiente de volumen  $V$  tienden a estar en el nivel de energía más bajo, denominándose a este proceso condensación. Esto lo predijo la teoría de S. N. Bose [2] y A. Einstein [3], en el año de 1925.

La condensación se presenta para sistemas que satisfacen la estadística de Bose-Einstein en donde el espín total es entero o cero. En la actualidad los átomos alcalinos como el sodio, isótopo de litio, potasio y rubidio se utilizan para formar condensados de Bose-Einstein [5, 6, 7]. El principio de exclusión de Pauli restringe el hecho de que dos fermiones no pueden ocupar un estado con los mismos números cuánticos. En este capítulo haremos la descripción teórica y encontraremos las condiciones necesarias para que se presente la condensación de Bose-Einstein. Un tratamiento más detallado de la teoría se encuentra en varios libros de física estadística [30, 31, 32].

### 2.2. Estadística cuántica.

La indistinguibilidad de las partículas idénticas es una propiedad de los objetos cuánticos difícilmente comprensible desde el punto de vista clásico. Conduce de forma natural al principio o postulado de simetrización o antisimetrización de la función de onda. Cuando la mecánica cuántica se aplica a sistemas de partículas idénticas, se requiere definir la simetría de la función de onda bajo el intercambio de cualquiera de dos partículas. Esta simetría implica un postulado fundamental de la mecánica cuántica: *el principio de exclusión de Pauli* y que está relacionado con el espín de las partículas. Las propiedades de un sistema de  $N$  partículas con espines enteros y semienteros difieren entre sí por lo que se puede hablar de dos tipos diferentes de estadísticas cuánticas: una para partículas de espín entero y otras para partículas con espín semientero. Las

partículas que tienen espín entero obedecen a la *estadística de Bose-Einstein*, y las partículas que tienen espín semientero obedecen a la *estadística de Fermi-Dirac*.

En la estadística de Bose-Einstein, la función de onda debe ser simétrica ante el intercambio de dos partículas idénticas. Supongamos que se tienen dos *bosones* idénticos en los estados  $r$  y  $s$  y sean  $\phi_r$  y  $\phi_s$  las correspondientes funciones de onda asociadas a dichos estados. Marcamos los dos bosones como 1 y 2, entonces el estado del sistema asociadas de dos partículas se describe por la función de onda  $\phi_r(1)\phi_s(2)$ . Como las partículas son indistinguibles, se podría escribir de forma equivalente la función de onda de este estado de la siguiente manera  $\phi_r(2)\phi_s(1)$ . Entonces para estos dos bosones, la función de onda correcta es la combinación lineal simétrica

$$\Psi_{BE}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_r(1)\phi_s(2) + \phi_r(2)\phi_s(1)), \quad (2.1)$$

donde el factor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  se obtiene al normalizar la función de onda cumpliéndose  $\langle \Psi_{BE} | \Psi_{BE} \rangle = 1$ . Intercambiando las partículas 1 y 2 obtenemos

$$\Psi_{BE}(2, 1) = +\Psi_{BE}(1, 2). \quad (2.2)$$

Este intercambio de dos partículas no altera el estado. Si ponemos a dos bosones en el mismo estado, es decir  $r = s$ , tenemos que la función de onda es  $\Psi_{BE}(2, 1) = \frac{2}{\sqrt{2}}\phi_r(1)\phi_r(2)$ , vemos entonces que dos partículas pueden estar en el mismo estado puesto que la función de onda no se anula. Esto se puede generalizar para un gas de bosones con  $N$  partículas idénticas

$$\Psi_{BE}(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \Psi_{BE}(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N). \quad (2.3)$$

En consecuencia, no existe una restricción alguna de que muchas partículas puedan ocupar el mismo estado. Este es el requerimiento básico de simetría para las funciones de onda que describen a los bosones.

Para el caso de la estadística de Fermi-Dirac, la función de onda para *fermiones* idénticos debe de ser antisimétrica

$$\Psi_{FD}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_r(1)\phi_s(2) - \phi_r(2)\phi_s(1)), \quad (2.4)$$

donde de nuevo el factor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  se obtiene al normalizar la función de onda. Al intercambiar dos *fermiones* tenemos

$$\Psi_{FD}(2, 1) = -\Psi_{FD}(1, 2). \quad (2.5)$$

De nueva cuenta, el intercambio de dos partículas no altera el estado del sistema, sólo le cambia el signo a la función de onda. El cambio de signo implica algo más: si se pone a dos fermiones en el mismo estado, es decir,  $r = s$ , la función de onda se anula, *i.e.*  $\Psi_{FD}(1, 2) = 0$ . En el caso de un gas de fermiones no puede haber dos partículas ocupando el mismo estado. A esto se le conoce como el *principio de exclusión de Pauli*. En forma general para un gas de fermiones compuesto de  $N$  partículas idénticas

$$\Psi_{FD}(1, 2, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = -\Psi_{FD}(1, 2, \dots, j, \dots, i, \dots, N). \quad (2.6)$$



Al considerar un sistema macroscópico constituido por un número muy grande de partículas,  $N \gg 1$ , renunciamos completamente a la idea de poder describir el comportamiento en forma individual de cada partícula, ahora se busca describir sus propiedades mediante las leyes estadísticas que caracterizan el comportamiento global del sistema. Lo que se busca es hallar la probabilidad  $w_i$  de que un subsistema elegido al azar ocupe el estado  $i$ -ésimo (microestado). Este subsistema pertenece al sistema macroscópico, y está constituido por un cierto número de partículas contenidas en un volumen dado a cierta temperatura. Si encontramos una distribución de probabilidades, podremos hallar *el número medio de partículas* que se encuentran en un estado o *el valor medio de cualquier propiedad que caracterice el estado*, por ejemplo su energía.

### 2.3. Distribuciones cuánticas.

Consideremos un recipiente de volumen  $V$ , conteniendo  $N$  partículas indistinguibles de un gas que no interaccionan entre sí y se encuentran a una temperatura  $T$ , es decir, sumergido en un baño térmico. Se especifica el estado del gas enumerando el número de partículas en cada estado posible de la siguiente manera:  $n_1$  partículas se encuentran en el estado 1,  $n_2$  partículas en el estado 2 y  $n_r$  en el estado  $r$ . Donde  $n_r$  representa el número de ocupación del  $r$ -ésimo estado. Los estados discretos de una sola partícula 1, 2, ...,  $r$  tienen energía  $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \leq \varepsilon_r$ . La energía total del gas se encuentra determinada por los números de ocupación  $n_1, n_2, \dots, n_r, \dots$

$$\sum_{r=1}^{\infty} n_r \varepsilon_r = E, \quad (2.7)$$

donde la suma es sobre todos los estados de una sola partícula. Además, se requiere

$$\sum_{r=1}^{\infty} n_r = N, \quad (2.8)$$

ya que existen  $N$  partículas en total.

Para el caso de un gas de bosones las partículas son consideradas como indistinguibles y como hemos visto no existe restricción sobre los números de ocupación  $n_r$ :

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, N. \quad (2.9)$$

De manera similar, en un gas de fermiones también consideramos a las partículas indistinguibles, pero existe una restricción sobre el número de ocupación  $n_r$ , es decir:

$$n_r = 0, 1 \quad . \quad (2.10)$$

Para calcular las funciones termodinámicas de un gas, como por ejemplo energía o presión, es necesario contar con una función que sume todos los microestados del sistema y que está constituido por ciertas propiedades del sistema como el número de partículas, volumen

y temperatura. Esta función se se le conoce como función de partición; en este caso para el ensamble gran canónico se define de la siguiente manera [30]

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} Z^N Q(T, V, N), \quad (2.11)$$

donde  $Q(T, V, N)$  es la función de partición canónica definida de la siguiente forma [30]

$$Q(T, V, N) = \sum_{\{n_r\}} \exp\left(-\beta \sum_{r=1}^{\infty} \varepsilon_r n_r\right),$$

donde  $\beta = \frac{1}{\kappa_B T}$ , con  $\kappa_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura y  $\mu$  es el potencial químico. Definimos a  $Z \equiv \exp(\mu/\kappa_B T)$  como la *fugacidad*. Considerando el hecho de que las partículas no interactúan entre sí, podemos desarrollar el término de la exponencial

$$\begin{aligned} \exp\left(-\beta \sum_{r=1}^{\infty} n_r \varepsilon_r\right) &= \exp(\beta(n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 + \dots)) \\ &= \exp(\beta n_1 \varepsilon_1) \exp(\beta n_2 \varepsilon_2) \cdots \\ &= \prod_{r=1}^{\infty} \exp(-\beta \varepsilon_r n_r). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Usando el mismo procedimiento para  $Z^N$ , obtenemos

$$Z^{\sum n_r} = \prod_{r=1}^{\infty} Z^{n_r}. \quad (2.13)$$

Ahora sustituimos las expresiones (2.12) y (2.13) en la función de partición (2.11), dando como resultado

$$\begin{aligned} \Xi(T, V, \mu) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_r\}} \prod_{r=1}^{\infty} Z^{n_r} e^{-\beta \varepsilon_r n_r} \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_r\}} \prod_{r=1}^{\infty} \left( Z e^{-\beta \varepsilon_r} \right)^{n_r}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Observamos que la doble sumatoria, respecto al número de partículas del sistema  $N$  y al número de partículas en el estado dado  $n_r$ , es equivalente a la suma ordinaria respecto de todos los posibles valores de  $n_r$  independientes. Es decir, para cuando se hayan sumado sobre todos los  $n_1, n_2, \dots$  para  $N$  fijo, seguido por la suma sobre todos los valores de  $N$ , se habrá sumado sobre todos los valores de  $n_r$ , independientemente entre sí. Dicho lo anterior, la función de partición se puede escribir de la siguiente manera

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{\{n_r\}} \prod_{r=1}^{\infty} \left( Z e^{-\beta \varepsilon_r} \right)^{n_r} \quad (2.15)$$

$$= \left[ \sum_{n_0=0}^{\infty} \left( Z e^{-\beta \varepsilon_0 n_0} \right) \right] \left[ \sum_{n_1=0}^{\infty} \left( Z e^{-\beta \varepsilon_1 n_1} \right) \right] \cdots, \quad (2.16)$$

donde los puntos representan los factores semejantes adicionales, con  $n$  y  $\varepsilon$  teniendo los sub-índices 2, 3, 4, ..., etc. La gran función de partición, como está expresada en la ecuación (2.16), nos permitirá encontrar las distribuciones correspondientes para las estadísticas de Fermi-Dirac (FD) y Bose-Einstein (BE), cuando distinguimos el número de ocupación  $n_r$  para cada estadística, según el principio de exclusión de Pauli.

Como la distribución estadística para cada estado de una sola partícula es independiente de los estados de otra partícula, la probabilidad  $p(n_1, n_2, \dots, n_r, \dots)$  de encontrar  $n_1$  partículas en el estado de una partícula 1,  $n_2$  partículas en el estado de una partícula 2, etc, la podemos expresar como el producto de cada una de ellas

$$p = \prod_{r=1}^{\infty} p(n_r). \quad (2.17)$$

La probabilidad  $p(n_r)$  de que un sistema a la temperatura  $T$  se encuentre en el estado  $n_r$ , con energía  $E_r$  está dada por la siguiente expresión

$$p(n_r) = \frac{\exp(-\beta n_r (\varepsilon_r - \mu))}{\Xi(T, V, \mu)}, \quad (2.18)$$

donde el término del denominador es la gran función de partición. Podemos encontrar una expresión para el número medio de ocupación  $\bar{n} = \sum_r n_r p_r$  del estado de una partícula del  $r$ -ésimo estado. Ésto lo obtenemos derivando  $\ln \Xi$  con respecto a  $\varepsilon_r$ , manteniendo fija a  $T$  y el volumen  $V$ , dividiendo entre  $\beta$ . Así tenemos

$$\bar{n}_r = -\frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial}{\partial \varepsilon_r} \ln \Xi \right)_{T, V} \quad (2.19)$$

$$\bar{n}_r = \frac{1}{Z^{-1} e^{\beta \varepsilon_r} + a} \quad (2.20)$$

donde  $a = +1, -1$  ó  $0$ , depende de la estadística en que estemos trabajando. El valor de  $a = +1$  corresponde a la estadística de FD y el valor de  $a = -1$  a la estadística de BE. Para el valor de  $a = 0$  corresponde al caso clásico de Maxwell-Boltzmann, la cual no ocuparemos en este trabajo. En la siguiente sección estudiaremos las estadísticas de FD y BE, a partir de la ecuación (2.16) tomando en cuenta los números de ocupación.

## 2.4. Estadística de Fermi-Dirac.

Consideremos un sistema de  $N$  fermiones idénticos (electrones, protones, etc.) en el interior de una caja de volumen  $V$  que impide cualquier intercambio de energía o partículas con el entorno. El número de partículas y la energía del sistema está dado por la ecuación (2.7) y (2.8) las cuales repetimos aquí

$$N = \sum_{r=1}^{\infty} n_r \quad (2.21)$$

$$E = \sum_{r=1}^{\infty} n_r \varepsilon_r. \quad (2.22)$$

Cuando  $N$  y  $E$  son constantes estas expresiones garantizan el aislamiento del sistema. Operando con la ecuación (2.16) y considerando que para la estadística de FD puede haber a lo más dos números de ocupación  $n_r = 0, 1$ , de manera que la función de partición para la estadística de FD tenemos

$$\Xi_{FD}(T, V, \mu) = \left[ \sum_{n_0=0}^1 (Z e^{-\beta \varepsilon_0})^{n_0} \right] \left[ \sum_{n_1=0}^1 (Z e^{-\beta \varepsilon_1})^{n_1} \right] \dots \quad (2.23)$$

Por lo tanto la ecuación (2.23) se puede escribir de la siguiente manera

$$\Xi_{FD}(T, V, \mu) = \prod_{r=1}^{\infty} [1 + Z e^{-\beta \varepsilon_r}]. \quad (2.24)$$

El número medio de ocupación lo obtenemos sustituyendo la ecuación (2.24) en (2.19)

$$\bar{n}_r^{FD} = \frac{1}{e^{-\beta \mu} e^{\beta \varepsilon_r} + 1}. \quad (2.25)$$

A esta ecuación se le conoce como la distribución de Fermi-Dirac. El número total de partículas se obtiene sustituyendo la ecuación (2.25) en (2.8) ó (2.21), teniéndose que

$$N = \sum_r \frac{1}{e^{(\varepsilon_r - \mu)\beta} + 1}. \quad (2.26)$$

Veamos ahora que pasa con el número de partículas en un estado cuando se baja la temperatura cercana al cero absoluto. Para  $\varepsilon_r < \mu$  y cuando la temperatura  $T \rightarrow 0$ , tenemos que  $e^{(\varepsilon_r - \mu)/(\kappa_B T)} \rightarrow 0$ , por lo tanto  $\bar{n}_r^{FD} \rightarrow 1$ , es decir en cada estado cuántico de partícula individual con energía inferior al potencial químico  $\mu$ , se encuentra solamente una partícula. Por otro lado, si  $\varepsilon_r > \mu$ , cuando la temperatura  $T \rightarrow 0$  se obtiene que  $e^{(\varepsilon_r - \mu)/(\kappa_B T)} \rightarrow \infty$ , por consiguiente,  $\bar{n}_r^{FD} \rightarrow 0$ , es decir, los estados cuánticos con energía  $\varepsilon > \mu$  están desocupados. Dicho de otro modo  $\bar{n}_r^{FD}$  toma los valores de 0 y 1 solamente. Esta relación refleja el principio de exclusión de Pauli. Además esto define  $\varepsilon_F = \mu(T = 0)$  como la energía de Fermi.

## 2.5. Estadística de Bose-Einstein.

Consideremos un gas de bosones que contiene  $N$  partículas idénticas en el interior de una caja de volumen  $V$  y a una temperatura  $T$ . Por lo tanto tenemos de nuevo las siguientes condiciones

$$N = \sum_{r=1}^{\infty} n_r \quad (2.27)$$

$$E = \sum_{r=1}^{\infty} \varepsilon_r n_r. \quad (2.28)$$

En la estadística de BE no existe restricción para los números de ocupación  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ , para todo  $r$ , i.e.  $n_r \in N$ . Nuestro objetivo es hallar la distribución de BE, para esto nuevamente

ocuparemos la ecuación (2.16). Sin pérdida de generalidad el término de la sumatoria sobre estados en la función de partición

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_{r=1}^{\infty} \left[ \sum_{n_r=0}^{\infty} Z e^{-\beta(\varepsilon_r)n_r} \right], \quad (2.29)$$

se puede simplificar mediante una serie geométrica

$$\sum_{n_r=0}^{\infty} (Z e^{-\beta\varepsilon_r})^{n_r} = \frac{1}{1 - Z e^{-\beta\varepsilon_r}}. \quad (2.30)$$

Sustituyendo esta última ecuación en (2.29) obtenemos la función de partición para la estadística de BE

$$\begin{aligned} \Xi_{BE}(T, V, \mu) &= [(1 - Z e^{-\beta\varepsilon_0})^{-1}] [(1 - Z e^{-\beta\varepsilon_1})^{-1}] \dots, \\ &= \prod_{r=1}^{\infty} [1 - Z e^{-\beta\varepsilon_r}]^{-1}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

que tiene sentido si  $Z < 1$  para que no diverja la función de partición.

De manera similar al caso de FD, procedemos a calcular el número medio de ocupación  $\bar{n}_r^{BE}$ . Sustituyendo la ecuación (2.31) en (2.19), tenemos

$$\bar{n}_r^{BE} = \frac{1}{Z^{-1} e^{\beta\varepsilon_r} - 1}. \quad (2.32)$$

Esta ecuación se le conoce como la distribución de Bose-Einstein. El número total de partículas lo obtenemos sustituyendo (2.32) en (2.27), así

$$N = \sum_r \frac{1}{Z^{-1} e^{\beta\varepsilon_r} - 1}. \quad (2.33)$$

El caso que nos interesa en este trábajo es cuando la temperatura se aproxima cerca del cero absoluto para un gas de bosones. Las propiedades, como por ejemplo, el número medio de ocupación o número total de partículas de este gas son muy diferentes a las propiedades de un gas de fermiones vistas al final de la sección anterior. Esta diferencia radica en que para un gas de bosones no hay restricción alguna en la acumulación de partículas en el estado de más baja energía, o sea en el estado base. A este fenómeno se le conoce como Condensación de Bose-Einstein (CBE). En la siguiente sección veremos sus principales características y el formalismo para llegar a la CBE.

## 2.6. Condensación de Bose-Einstein.

Consideremos un gas de bosones compuesto de  $N$  partículas libres que no interactúan entre sí, con masa  $m$  que se mueven dentro de una caja de tamaño  $L$ , es decir el potencial es cero. Mediante la ecuación de Schrödinger obtenemos la energía para un estado  $\varepsilon_r$

$$\varepsilon_r = \frac{\pi^2 \hbar^2 r^2}{2mL^2}, \quad (2.34)$$

con  $r^2 = r_x^2 + r_y^2 + r_z^2$  y  $r_i = 0, 1, 2, \dots$

Deseamos encontrar la densidad de estados con energía entre  $\varepsilon_r$  y  $\varepsilon_r + d\varepsilon_r$ . Por lo que el número de estados  $\sum_r$  se obtiene al remplazar la suma de los estados entre  $\varepsilon_r + d\varepsilon_r$  por una integral haciendo el límite al continuo

$$\sum_r \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k, \quad (2.35)$$

donde  $k$  es el vector de onda de la partícula y usando la relación de su energía cinética  $\varepsilon_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , despejamos a  $k$  y lo sustituimos en la integral (2.35), con lo que llegamos a

$$\sum_r \rightarrow \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon, \quad (2.36)$$

en donde  $L^3 = V$ . Así, la densidad de estados de una partícula  $\Omega(\varepsilon) = \frac{d\sum_r}{d\varepsilon}$  esta dada por la siguiente expresión,

$$\Omega(\varepsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2}. \quad (2.37)$$

Ahora, tomemos la distribución de BE

$$\bar{n}_r = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} - 1}.$$

El potencial químico  $\mu$ , en estas condiciones, nunca puede ser un número positivo, ya que si esto fuera posible habría valores para  $\varepsilon_r$  para los cuales  $\varepsilon_r - \mu$  nos daría valores negativos de  $\bar{n}_r$ , lo cual es físicamente incorrecto. Por lo que el potencial  $\mu$  se restringe a valores negativos teniendo como valor máximo al cero,  $-\infty \leq \mu \leq 0$ . Llamamos  $\bar{n}_0$  el número de partículas con  $\varepsilon_{r=0} = 0$ , por lo que tenemos entonces

$$\bar{n}_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}. \quad (2.38)$$

Como se mencionó en el párrafo anterior  $\mu$  es finito y negativo. Cuando  $\mu \rightarrow 0$ , el término de la fugacidad  $e^{-\beta\mu}$  tiende a 1 para  $\beta$  fija y  $\bar{n}_0$  crece sin límite, esto es, la población del estado base podría pensarse que sería  $\bar{n}_0 \approx N$  donde  $N$  es el total de número de partículas del sistema. Ahora bien, teniendo esto en cuenta, tomemos la ecuación (2.33), haciendo el límite al continuo y sumando la densidad de estados de una partícula mediante la integral (2.36), tenemos

$$N = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon. \quad (2.39)$$

El máximo valor que puede tomar  $\mu$  es  $\mu = 0$  y esto define  $N_{max}$ , así

$$N_{max}(\mu = 0) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \quad (2.40)$$

donde la integral tiene la forma [33]

$$g_\nu(Z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1} dx}{Z^{-1}e^x - 1} \quad 0 \leq Z \leq 1, \quad \nu \in \mathbf{R}, \quad (2.41)$$

donde  $\Gamma(\nu)$  es la función Gamma. La solución de  $g_\nu(Z)$  [33] está dada por

$$g_\nu(Z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{Z^k}{k^\nu} \quad 0 \leq Z \leq 1. \quad (2.42)$$

Esta última expresión tiene como caso particular la función Zeta de Riemann  $\zeta(\nu)$ , para  $Z = 1$ , es decir con  $\mu = 0$ . De esto tenemos que

$$g_\nu(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\nu} = \zeta(\nu) \quad \nu > 1, \quad (2.43)$$

la cual existe sólo para  $\nu > 1$ . Usando el hecho que  $\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612$  y  $\Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ , se obtiene

$$\frac{N_{max}}{V} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}. \quad (2.44)$$

Esta ecuación predice que el número máximo de partículas por unidad de volumen es finito y varía a razón de  $T^{3/2}$ . Por otro lado a  $T = 0$  el número máximo es cero ( $N_{max} = 0$ ), que contradice el hecho de que deben haber partículas. El error se encuentra en la suma discreta sobre los estados, que resolvimos directamente de la integral ignorando que a bajas temperaturas, el primer término vale  $\varepsilon_r = 0$  y no se está considerando. A bajas temperaturas no se debe omitir este estado. Entonces el número total de partículas ahora estará compuesto por el número de partículas en el estado base más las partículas que se encuentran en los estados excitados

$$N = N_0 + N_e. \quad (2.45)$$

Podemos simplificar la notación llamando  $N_0$  al número de partículas en el estado base

$$\bar{n}_0 = N_0 = \frac{1}{Z^{-1} - 1}, \quad (2.46)$$

y  $N_e$  al número de partículas en los estados excitados

$$N_e = \int_0^\infty \frac{\Omega(\varepsilon) d\varepsilon}{Z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1}. \quad (2.47)$$

De forma que podemos escribirlo de la siguiente manera sustituyendo las ecuaciones (2.46) y (2.47), obtenemos

$$N = \frac{1}{Z^{-1} - 1} + \int_0^\infty \frac{\Omega(\varepsilon)}{Z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon. \quad (2.48)$$

La integral de la ecuación (2.47) se resuelve de la misma manera que la (2.39), dando como resultado

$$N_e = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(Z), \quad (2.49)$$

donde  $\lambda$  es la longitud térmica de de Broglie dada por

$$\lambda = \left( \frac{h^2}{2\pi m \kappa_B T} \right)^{1/2}. \quad (2.50)$$

Por otro lado  $g_{3/2}(Z)$  esta acotada

$$0 \leq g_{3/2}(Z) \leq \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \quad \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612.$$

Lo que sugiere que el segundo término de la ecuación (2.48) esta igualmente acotado

$$N_e^{max} = V \left( \frac{2\pi m \kappa_B T}{h^2} \right)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \quad (2.51)$$

El potencial químico es función de la temperatura  $\mu = \mu(T)$ , y además  $\mu$  crece si  $T$  decrece,  $\mu(T) \in (-\infty, 0]$ , puesto que  $\mu = \frac{\partial E}{\partial N}$ . Entonces existe una temperatura mínima  $T_c$ , tal que, para  $T = T_c$  el potencial químico se anula  $\mu = 0$ , dicho de otro modo  $T(\mu = 0) = T_c$ . Por arriba de esta temperatura,  $T > T_c$ , no hay partículas en el estado base y las partículas se encuentran en los estados excitados  $N_e$ .

Si  $N_0 = 0$ , entonces existe una temperatura crítica  $T_c$  en el límite  $Z \rightarrow 1$ . Formalmente lo escribimos

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow T_c} N_e &= \frac{V}{\lambda_c^3} \lim_{Z \rightarrow 1} g_{3/2}(Z) \\ &= \frac{V}{\lambda_c^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right), \end{aligned} \quad (2.52)$$

en donde  $\lambda_c$  es la longitud de onda de de Broglie a la temperatura crítica.

Por debajo de  $T_c$  el número de partículas con energía diferente de cero está dada por la ecuación (2.47), conforme  $T \rightarrow 0$  el término  $N_0$  aumenta. Si  $T$  decrece los estados excitados se despoblan y  $N_0$  comienza a ocuparse. Como  $N_e$  está acotado como función de  $T$ , existe una  $T_c$  a la cual se presenta la condensación, ya que al disminuir la temperatura  $N_0$  se vuelve el término dominante. Podemos escribir la fracción de partículas  $N_0/N$  en el estado base como

$$\begin{aligned} \frac{N_0}{N} &= \frac{N - N_e}{N} \\ &= 1 - \frac{N_e}{N} \\ &= 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{3/2}, \quad T < T_c. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Sí  $T = 0$  todas las partículas del sistema ocupan el mismo estado base  $N_0 = N$ . Muy cerca del cero absoluto esta ocupación es predominante y el resto de las partículas están distribuidas en los estados de más baja energía. A este fenómeno se le conoce como *condensación Bose-Einstein*. A temperaturas mayores que  $T_c$ ,  $N_0 \approx 0$  y ya no se presenta la condensación (ver



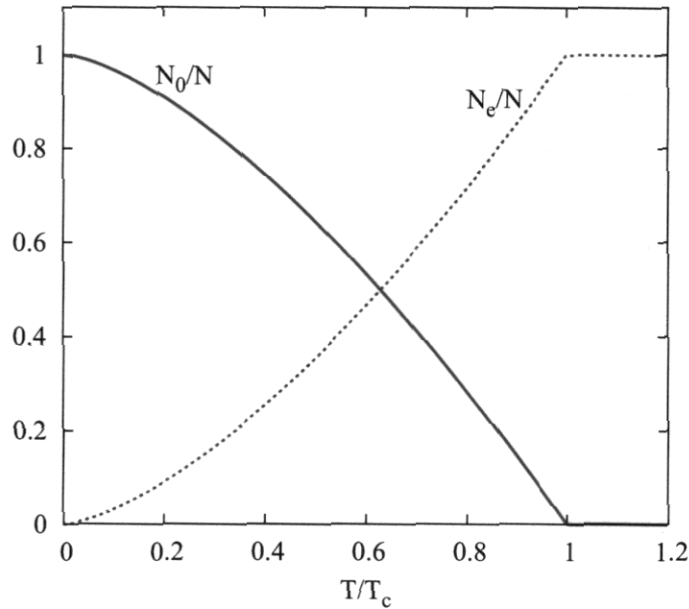


Figura 2.1: La fracción de partículas en el estado excitado  $N_e/N$  (línea punteada) contiene a todas las partículas cuando  $T \geq T_c$ , en ese instante no existen partículas en el estado base. La transición de fase comienza a ocurrir cuando  $T = T_c$ . En este momento las partículas empiezan a desocupar los niveles de energía excitados y el estado base comienza a poblarse (línea continua), llegando a ser  $N_0 = N$  a  $T = 0$ .

figura 2.1).

A  $T_c$  se le conoce como la temperatura crítica a la cual empieza la condensación de Bose-Einstein y cuando  $T = 0$  se da un condensado puro de Bose, es decir todas las partículas están en el estado base con longitud de onda de de Broglie infinita. Existe una relación entre  $T_c$  y la densidad promedio  $\rho = \frac{N}{V}$  dada en términos de la longitud de onda térmica de de Broglie  $\lambda$ . Cuando se alcanza  $T_c$ , por arriba, la distancia entre las partículas disminuye y se empieza a comparar con la longitud de onda de de Broglie  $\lambda_c$  de cada partícula y podemos decir que su función de onda se empieza a traslapar, es decir se cumple

$$\frac{N}{V} \left( \frac{h^2}{2\pi m \kappa_B T_c} \right)^{3/2} = \zeta \left( \frac{3}{2} \right) \rightarrow \rho^{1/3} \lambda_c \approx 1. \quad (2.54)$$

Las densidades que se alcanzan experimentalmente, necesarias para un CBE, son del orden de  $\rho \sim 10^{15}$  átomos/cm<sup>3</sup>. Para ello se necesita alcanzar temperaturas extremadamente bajas. La temperatura crítica  $T_c$  se encuentra en el intervalo de 20 nK hasta  $\mu$ K. Por ejemplo, la temperatura crítica para un gas de sodio ( $^{23}Na$ ), con una densidad de  $10^{14}$  átomos/cm<sup>3</sup>, es de  $T_c = 2\mu$  K [9].

El primer condensado de Bose-Einstein fué reportado, en el año de 1995, por el grupo de Eric Cornell y Carl Wieman en JILA [8], donde consiguieron enfriar 2000 átomos de  $^{87}Rb$  a una

temperatura de  $170 \text{ nK}$ . Cuatro meses después, de manera independiente, el grupo de Ketterle [9] en el MIT obtenía condensados de sodio cien veces más grande.

En la temperatura crítica  $T_c$ , la transición de fase ocurre para un gas bosónico tal que un gas clásico se transforma en un gas degenerado de átomos o partículas indistinguibles en la que se traslapan las funciones de onda de las partículas. Esto da origen a efectos puramente cuánticos, pues la superposición de átomos genera una macro función de onda cuántica. Debido a la propiedad ondulatoria de estas partículas a esto se le conoce como **onda de materia**. Esta onda de materia puede manipularse con trampas magnéticas en micro-circuitos que están hechos por alambres que conducen corrientes. A estos circuitos se le llaman *chips atómicos*. En el siguiente capítulo daremos una introducción sobre guías de onda de materia y chips atómicos que permiten controlar dicha onda de materia.

# Capítulo 3

## Chips atómicos y guías de onda de materia.

### 3.1. Introducción.

Como hemos visto en el capítulo anterior, cuando un gas de bosones se enfría bajo condiciones especiales éste se condensa. Sin embargo, estos átomos neutros pueden interactuar con campos electromagnéticos y por lo tanto podemos atraparlos y manipularlos. Los aparatos que producen dichos campos magnéticos son conocidos como *trampas magnéticas*. Las trampas magnéticas para átomos neutros tienen muchas aplicaciones en la física atómica y óptica cuántica. Por ejemplo se usan para confinar y estudiar los condensados de Bose-Einstein (CBE). Esto se logra por la interacción que existe entre el campo magnético y los átomos ultra-fríos, basándose principalmente en el efecto *Zeeman*. Los átomos alcalinos tienen propiedades que les permiten ser atrapados o manipulados a través de los niveles de su estructura fina o niveles hiperfinos.

Para poder manipular y guiar a los CBE se desarrollaron aparatos experimentales conocidos como *chips atómicos*. A diferencia de un micro-chip convencional que mueve electrones dentro de trampas miniaturas formadas por alambres enrollados, resistencias, capacitores, etc, aquí los átomos se encuentran a unos micrómetros de la superficie del chip, estos se encuentran confinados en paredes creadas por el campo magnético que generan las corrientes que fluyen por los alambres que constituyen el chip atómico. Las paredes de las trampas magnéticas ayudan a los átomos a mantenerse en su ambiente de baja temperatura. Mediante este proceso se puede controlar y manipular la posición y velocidad de la nube electrónica de los átomos que forma el condensado [20, 34, 35]. Estas paredes forman canales que permiten guiar a los condensados de Bose-Einstein, las cuales pueden contener más de diez millones de átomos.

Estos chips atómicos se empezaron a desarrollar a principios del año 2001 [24, 25, 26, 27, 36, 37], que de forma simultánea intensificaron los estudios teóricos y experimentales para perfeccionar interferómetros [16, 17, 38] basados en guías de onda de materia. En el año 2002 se obtuvieron los primeros resultados experimentales sobre chips atómicos usando CBE [22, 35]; ésto se logró montando trampas de diferentes geometrías, por ejemplo X, Y, U o Z (ver figuras 3.5, 3.6 y 3.7). En estos estudios se observaron que se puede transportar CBE dentro de chips

atómicos [39, 40, 41, 42]. Con esto surge el campo de investigación de guías de onda de materia en chips atómicos.

En este capítulo se presenta una introducción breve de cómo se pueden manipular los átomos mediante trampas magnéticas y algunos de los diseños que se usan para producir guías de ondas. Estos elementos básicos (guías de ondas) forman parte de la estructura de un *chip atómico*.

## 3.2. Estructura atómica de los átomos alcalinos.

Antes de pasar a las secciones que conforman este capítulo es importante señalar que los átomos ultra-fríos o condensados de Bose-Einstein están compuestos de átomos alcalinos. La estructura electrónica en su estado base es simple: tiene capas llenas excepto la última pues tiene un electrón desapareado. En ausencia de un campo magnético externo los niveles atómicos se desdoblan por la interacción hiperfina ( $H_{hf}$ ), de manera que el acoplamiento del espín nuclear y el espín electrónico está dado por  $H_{hf} = C\mathbf{I}\cdot\mathbf{J}$ , donde  $C$  es una constante,  $\mathbf{I}$  y  $\mathbf{J}$  son los operadores para el espín nuclear y el momento angular total electrónico, respectivamente. El operador total del momento angular es  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$ . Si a este sistema atómico se le pone un campo magnético externo, los niveles de energía de un átomo se desdoblan debido al campo magnético. A este fenómeno se le conoce como efecto *Zeeman*.

La característica importante de los átomos alcalinos es que el electrón que queda en la última capa al interactuar con un campo magnético externo, permitirá que se pueda manipular el átomo variando la intensidad del campo.

## 3.3. Interacción magnética.

Los átomos neutros pueden manipularse por medio de su interacción con campos magnéticos. El espín de un átomo en una trampa magnética precesa alrededor de la dirección del campo magnético local con frecuencia  $\omega_L$ , conocida también como la precesión de Larmor<sup>1</sup>. Al mismo tiempo el centro de masa oscila en el campo con una frecuencia vibracional  $\omega_{vib}$ <sup>2</sup>. Sin embargo la precesión de Larmor  $\omega_L$  del momento magnético es mucho más grande que la frecuencia vibracional  $\omega_{vib}$ . Si la frecuencia de oscilación vibracional es mucho menor que la frecuencia de oscilación de Larmor  $\omega_{vib} \ll \omega_L$ , la componente del momento angular  $F_z$  a lo largo de la dirección del campo local se aproxima a una constante de movimiento. A la condición  $\omega_{vib} \ll \omega_L$  se le conoce con el nombre del *límite adiabático*. Bajo estas condiciones, el átomo se mueve en un potencial efectivo dado de la siguiente manera

$$V = -\mu_m \cdot \mathbf{B}, \quad (3.1)$$

donde el momento dipolar magnético del átomo está definido como  $\mu_m = g_F \mu_B m_F$ , donde  $g_F$  es el factor de Landé,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr y  $m_F$  es el número cuántico magnético

<sup>1</sup>El subíndice L nos referimos a la frecuencia de Larmor, L=Larmor

<sup>2</sup>En este caso el subíndice vib nos referimos a la frecuencia vibracional, vib=vibracional

de la componente  $F$ . Dependiendo del signo de  $g_F m_F$ , la partícula experimenta una fuerza magnética, ya sea hacia el mínimo ( $g_F m_F > 0$ ) ó hacia el máximo ( $g_F m_F < 0$ ) del campo.

Para el primer caso, cuando  $g_F m_F > 0$ , el átomo se dirige hacia donde el campo magnético crece, teniendo el mínimo de la energía potencial en el máximo del campo magnético. Se dice que los átomos están en busca de campos fuertes: *strong field seeking* (SFS). En contraste si la dirección del momento magnético es opuesta al campo magnético, es decir  $g_F m_F < 0$ , los átomos son repelidos de las regiones donde el campo magnético es intenso buscando en donde el campo sea mínimo  $\mathbf{B}_{min}$ , es decir los átomos buscan campos débiles: *weak field seeking* (WFS) [43]. Ahora en el mínimo del campo magnético  $\mathbf{B}$  se encuentra el mínimo de energía de potencial. Está es la idea principal de las micro-trampas magnéticas que consiste en generar campos magnéticos producidos por ciertas configuraciones de alambres que conducen corriente, haciendo que los átomos neutros busquen el campo mínimo (WFS) para que sean atrapados o guiados dentro de él. De este modo, el átomo puede estar confinado cerca del mínimo del campo.

Para visualizar los átomos en los estados SFS y WFS consideramos el siguiente ejemplo. Supongamos que tenemos átomos neutros a una distancia  $r$  de un alambre infinito en el cual fluye una corriente. El alambre al llevar la corriente producirá un campo magnético. En ese instante los átomos experimentaran una fuerza magnética. Si su potencial de interacción con este campo es negativo tendrá como el mínimo de potencial en el máximo del campo, entonces los átomos se moverán alrededor del alambre (parte (a) de la figura 3.1). Se dice que los átomos se encuentran en el estado SFS.

Por otro lado, si el potencial de interacción es positivo y además se le suma un campo magnético externo  $\mathbf{B}_b$ <sup>3</sup> en dirección perpendicular al alambre, da como resultado un campo mínimo que se encuentra a una distancia  $r_0$  del conductor. Los átomos son repelidos donde el campo magnético es intenso buscando el campo mínimo. Se dice entonces que los átomos se encuentran en el estado WFS (parte (b) de la figura 3.1) y se forma una guía de átomos o guía de onda de materia.

En la siguiente sección veremos algunas de las diferentes configuraciones que existen para producir algunas formas de guías, que a la vez nos permitirá diseñar las micro-trampas magnéticas las cuales forman parte de los chips atómicos.

### 3.4. Guías de onda.

Cuando se superponen dos campos magnéticos puede generar nuevas configuraciones en el campo magnético resultante  $\mathbf{B}$ . Uno debe de considerar siempre la magnitud y dirección de cada campo. Este principio de superposición se aplica para crear dispositivos magnéticos que permitan hacer diferentes configuraciones de guías de onda. Actualmente existen varios diseños para los diferentes tipos de geometrías en las guías [20, 21, 45, 46, 47]. El ejemplo más sencillo es la guía conocida como *side guide* (ver figura 3.2).

La guía *side guide* se muestra en las figuras 3.2 y 3.3 en donde se puede observar la manera

<sup>3</sup>El término  $B_b$  indica que se le aplica un campo magnético de corte o de sésgo al campo producido por el alambre. En sus siglas en ingles b=bias.

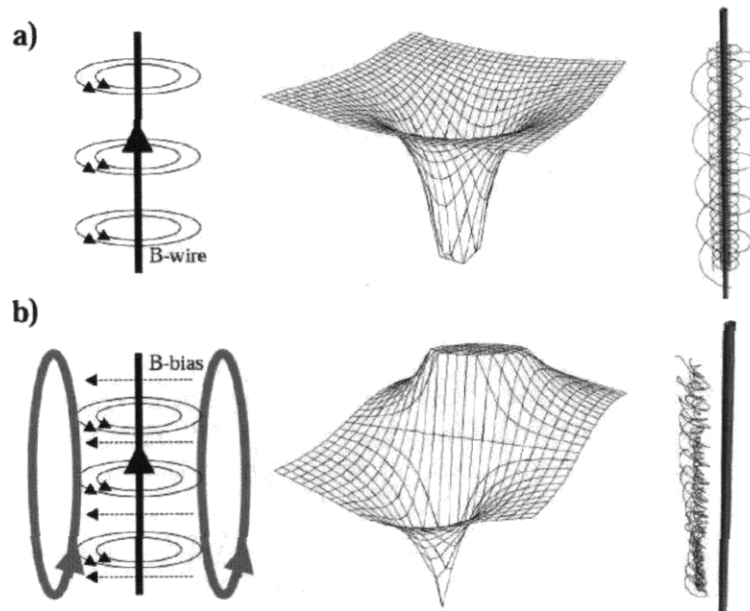


Figura 3.1: En esta figura se muestra como se guían átomos neutros usando un campo magnético que produce un alambre infinito que conduce corriente. a).- Los átomos son guiados alrededor de un alambre y se encuentran en el estado *strong field seeking*. b).- En este caso, además del campo magnético producido por el alambre, se le suma un campo externo  $B_{bias}$  perpendicular a este. Los átomos se mueven en el campo mínimo y se encuentran en el estado *weak field seeking*. Las bobinas de Helmholtz que se muestran en b) generan un campo magnético de sesgo  $B_{bias}$ . De lado derecho se muestran las trayectorias de los átomos en el máximo y mínimo del campo magnético [44].

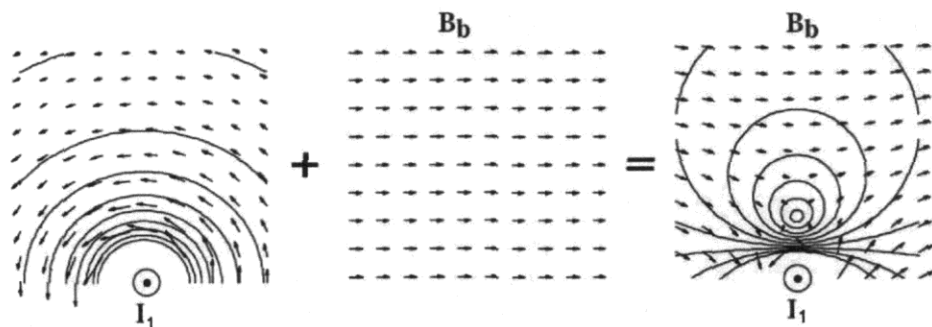


Figura 3.2: Diseño básico de una trampa magnética (guía de onda “side guide”). Se suma el campo magnético producido por un alambre ( $I_1$ ) más un campo externo ( $B_b$ ) constante perpendicular al alambre, dando como resultado una guía en donde el campo magnético tiene un mínimo a una distancia  $r_0$  sobre el alambre [47].

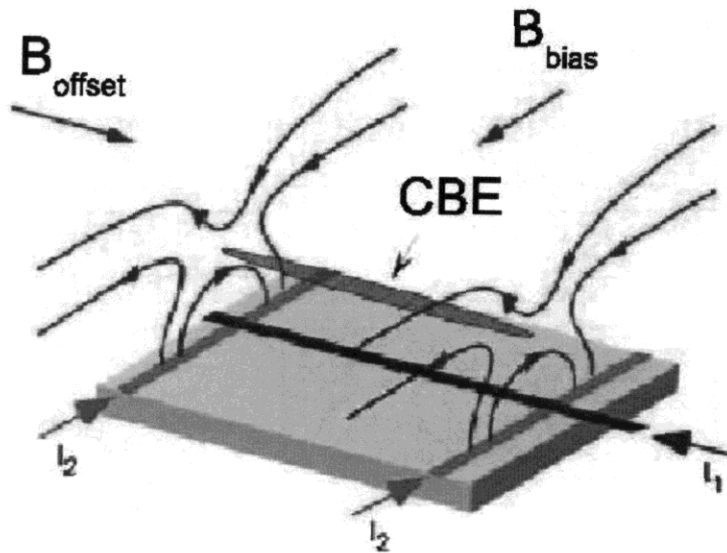


Figura 3.3: Esquema que muestra una guía “side guide”. La figura muestra las líneas de campo producidos por  $I_1$ . De igual manera observamos el campo de sesgo  $B_b$  en forma perpendicular al conductor  $I_1$ . También muestra la nube de átomos que forma el condensado de Bose-Einstein al ser atrapado en la guía. A lo largo del CBE se le aplica un campo  $B_{offset}$  para que se siga cumpliendo la condición adiabática dentro de la guía de onda [48].

en que funciona. La figura 3.3 muestra las líneas de campo que guían a un CBE así como dos corrientes auxiliares  $I_2$  que atrapan longitudinalmente al CBE. Este tipo de componentes es la base de los chips atómicos. La superposición de los campos magnéticos generados por el conductor  $I_1$  y de un campo externo de sesgo,  $B_b$ , produce un mínimo a una distancia  $r_0$  del alambre  $I_1$ . También se le aplica un campo magnético  $B_{offset}$  para que los átomos que forman el condensado sigan cumpliendo la condición adiabática. Los conductores  $I_2$  tienen como función la de confinar al condensado longitudinalmente. Esto produce que la forma del condensado en un chip atómico sea como un “cigarro”.

Si hacemos un corte transversal de la figura 3.3 vemos las líneas de campo que dan forma a la guía que se encuentra a una distancia  $r_0$  del alambre (ver figura 3.2), donde

$$r_0 = \frac{\mu_0 I_1}{2\pi B_b}. \quad (3.2)$$

Esta distancia  $r_0$  se obtiene conociendo el campo  $B_b$  y se obtiene de la ecuación de Biot-Savart. Alrededor de esta línea el módulo del campo magnético incrementa en todas direcciones formando una especie de “tubo” (geometría cilíndrica) teniendo un mínimo del campo magnético en el centro. Ahora bien, los átomos en el estado *weak field seeking* (descrito en la sección anterior) pueden atraparse y ser guiados a lo largo del tubo (ver figura 3.2). Esta guía tiene como característica la de tener un potencial armónico en el centro.

Otra variante a este tipo de guía es el llamado “two guide” que consiste en colocar dos alambres en los cuales fluyen corrientes en sentidos opuestos, con un campo externo  $B_b$  ortogonal

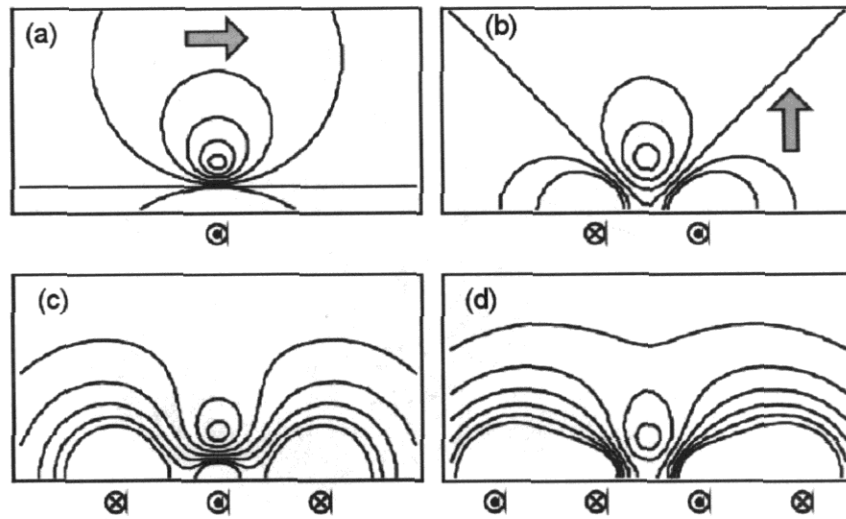


Figura 3.4: Líneas de campo para diferentes tipos de configuraciones de guías de onda con uno o más alambres. (a) Se muestra el potencial para una guía tipo “*side guide*” generada por un alambre y un campo magnético externo (representado por la flecha) a lo largo de la superficie donde el alambre está situado. (b) En este cuadro observamos la configuración de la guía del tipo “*two guide*”, que consiste en dos alambres con un campo externo perpendicular a la superficie de los alambres (representado por la flecha). (c) Aquí se muestra que la combinación de tres conductores se obtiene una guía de onda que se encuentra en medio de los tres alambres. (d) En este esquema se observa que el campo externo puede ser omitido si se alternan cuatro alambres que conducen corriente en sentidos opuestos [47].

al plano que contiene los dos alambres separados a una distancia  $d$  (ver (b) de la figura 3.4). Se puede obtener otra configuración al colocar dos alambres que conducen corriente en la misma dirección y un tercer alambre en medio de estos con corriente opuesta. La suma de los tres campos magnéticos da lugar a una guía por arriba del tercer alambre (ver (c) de la figura 3.4). Una más de estas configuraciones se puede construir alternando cuatro alambres que conducen corriente en sentidos opuestos. Generando la guía entre el segundo y el tercer conductor (ver (d) de la figura 3.4).

Las trampas tipo *side guide* y *two guide* describen el caso para el confinamiento de átomos a lo largo de un alambre. En experimentos reales los alambres no son infinitos o suficientemente grandes, por lo que el potencial de atrapamiento depende en dónde termine el conductor y de su grosor. Esto da lugar a configuraciones de guías de ondas más sofisticadas con geometrías en forma de “U” y de “Z” (ver figura 3.5), donde efectos de interferencia ocurren. En particular, en las esquinas o curvas pueden ocurrir procesos de pérdida de átomos en el condensado.

Combinando guías del tipo *side guide* y *two guide* se obtienen guías de la forma Y y X que se usan para experimentos de interferencia [17, 49, 50]. Esto funciona colocando una guía del tipo *side guide*, en un punto de esta guía se divide en dos mediante un arreglo de otros dos alambres que se van separando formando dos “brazos” y en cada brazo se forma una guía. Esta guía tiene la forma de Y (ver figura 3.6). También se puede acercar guías *side guide* que se dirigen hacia



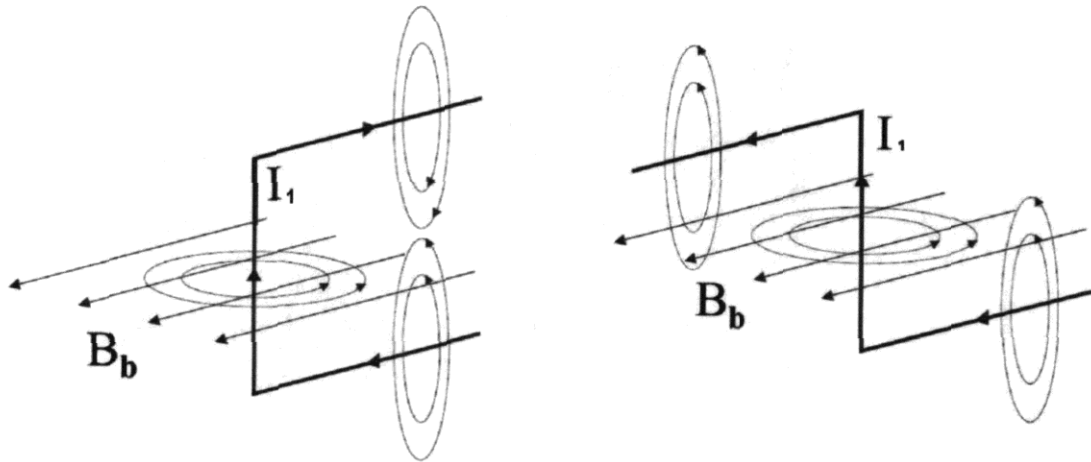


Figura 3.5: Un conductor puede doblarse formando diferentes geometrías [23]. (a) Trampa con geometría en forma de U. (b) Trampa con geometría en forma de Z.

un mismo punto, al llegar a cierta distancia se vuelven a separar. Esta guía tiene una forma de X (ver figura 3.7). Se pueden modificar estas guías usando guías tipo *two guide*. Estas formas de guías Y y X, al hacer pasar átomos fríos en ellas, hace que se dividan en dos partes y en cada uno de los “brazos” funciona como una guía de onda de materia. Mediante configuraciones similares de guías, se hacen que se vuelvan a unir los átomos que fueron separados. El resultado es que se observaron patrones de interferencia de ondas de materia [51, 52, 53, 54].

El estudio de guías de ondas es un tema muy amplio y novedoso que por su propio mérito es material suficiente para otro trabajo de investigación. Aquí sólo hemos mencionado los aspectos básicos que nos permitirán entender el funcionamiento de los *chips atómicos* que forman o crean las guías de onda y que en la siguiente sección trataremos.

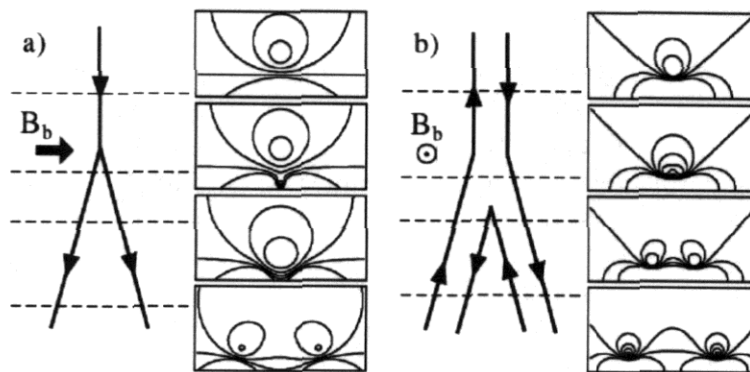


Figura 3.6: Se muestra el esquema de una trampa con geometría en forma de Y. a) Se forma una Y usando la guía *side guide*. b) Se obtiene la misma Y pero ahora se usa la guía *two guide* [47]. También se muestran las líneas de campo que forman la guía de onda de materia.

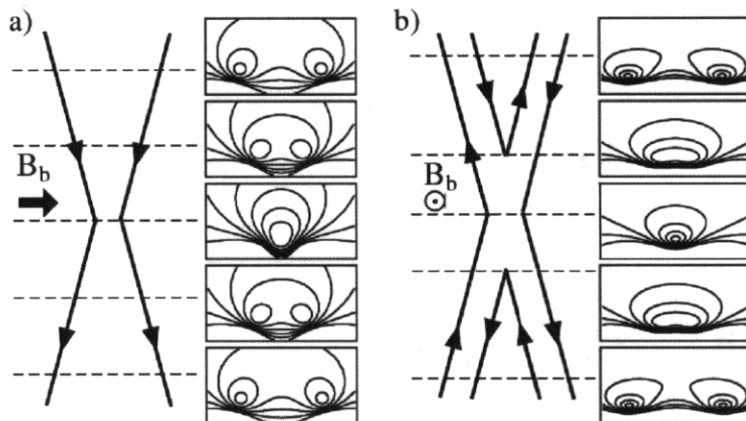


Figura 3.7: En esta figura se muestra la trampa con geometría en forma de X. a) Se forma una guía en X usando una configuración más simple: *side guide*. b) La misma forma en X se forma usando una guía del tipo *two guide* [47]. También se muestran las líneas de campo que forman la guía de onda de materia.

### 3.5. Chip Atómico.

Hasta ahora se han discutido las diferentes formas de guías de onda y sus geometrías que nos permiten manipular a los átomos ultra-fríos. Experimentalmente ya se logró mantener a las ondas de materia (CBE) confinadas sobre la superficie de los chips y posteriormente guiarlas. Durante el movimiento de los CBE en las guías se pierde una cantidad de átomos al interactuar con dichas guías por el cual se mueven, haciendo que la nube de átomos reduzca su tamaño o en el caso límite se destruya por completo. Por ejemplo, si se tiene una guía de geometría Z, el condensado al pasar en una esquina puede haber cierto número de átomos que queden atrapados o que se reflejen haciendo que estos choquen con los átomos que vienen de atrás, de manera que la nube de átomos se pierda o interfiera y con esto modificar su forma (ver figura 3.8).

También se tienen chips atómicos con trampas magnéticas en forma de U. Cuando el condensado se mueve en esta guía de la trampa se pueden perder los átomos o quedar atrapados (ver figura 3.8). Para trampas cuya geometría es del tipo Y, que se usan para experimentos de interferencia, se pueden perder cierto número de átomos en la unión de la Y. Se sabe que la velocidad de un CBE es del orden de  $10^{-3}$ m/s, a pesar de que esta velocidad es muy lenta para sistemas macroscópicos se pierde una cantidad considerable de átomos, debido a efectos de confinamiento e interferencia. En la figura 3.9 se ven dos fotografías reales de dos chips atómicos del grupo experimental de Australia [40].

Aquí es donde radica nuestro interés sobre este tema de guías de onda en chips atómicos: poder calcular el número de átomos de un condensado de Bose-Einstein que pasa por ciertos pozos que generan las trampas magnéticas. En particular estudiaremos potenciales de atrapamiento que tienen la forma de un pozo cuadrado, un armónico, doble armónico y un pozo de forma triangular. En otras palabras si el condensado se mueve en una guía de onda con diferentes

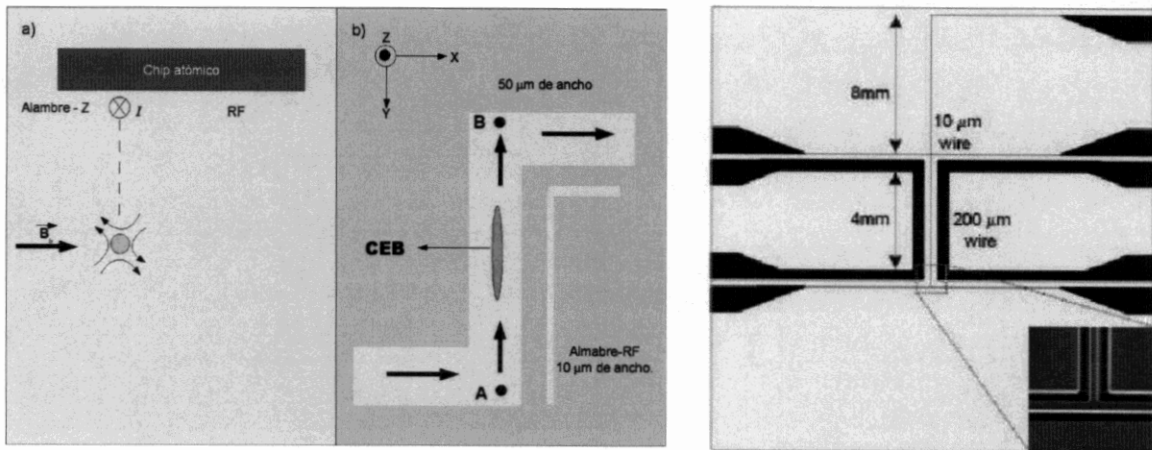


Figura 3.8: En el lado izquierdo se muestra un condensado que se mueve en una trampa en forma de Z de un chip atómico. a) La figura representa un chip atómico que es vista de lado. b) En esta figura se muestra al chip atómico vista desde arriba. Al pasar el condensado en los puntos A y B de la guía se puede perder o atrapar una gran cantidad de átomos. En el lado derecho se muestra la superficie de un chip atómico con una trampa magnética en forma de U. El tamaño del alambre es de  $200\ \mu\text{m}$  de largo con un grosor de  $10\ \mu\text{m}$  [55].

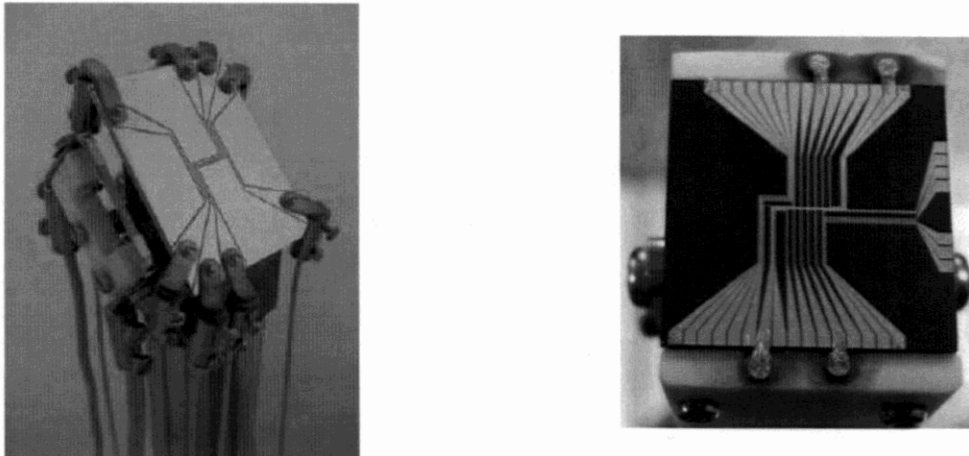


Figura 3.9: En la ilustración vemos dos chips atómicos que miden entre 5 cm y 3 cm de cada lado [40].

potenciales el problema a resolver es: *¿Cuántos átomos de un CBE (onda de materia) quedan atrapados en la microtrampa?* Para esto se necesita describir la onda de materia mediante una ecuación que nos permita conocer su dinámica. La ecuación que gobierna y describe al condensado es la ecuación de *Gross-Pitaevskii*. Esta ecuación es similar a la de Schrödinger, salvo que tiene un término no-lineal que proviene de las interacciones de los átomos del condensado. En el siguiente capítulo se estudiará en detalle el formalismo de esta ecuación.



# Capítulo 4

## Ecuación de Gross-Pitaevskii.

### 4.1. Introducción.

A temperaturas menores que la temperatura crítica  $T_c$ , un gas bosónico se condensa haciendo que una gran cantidad de átomos ocupen el mismo estado de energía (ver capítulo 2). Esto hace que la longitud de onda de de Broglie,  $\lambda_{dB}$ , de cada átomo crezca y estos se traslapen entre sí. Por consiguiente, basta una sola función de onda que represente el agregado de átomos que forma un condensado de Bose-Einstein (CBE), es decir  $\Psi(\vec{r}, t)$ . El condensado está formado por átomos alcalinos cuya separación entre ellos es del orden de 100 nm [56]. En este caso, los efectos dominantes de interacción se presentan en las colisiones binarias de corto alcance entre las partículas. De forma que a bajas energías, para un gas diluido, la interacción se puede modelar mediante potenciales de contacto o de corto alcance.

Para estudiar la estructura de la nube de átomos que forma el CBE es necesario tomar en cuenta la interacción de los  $N$ -átomos que lo forman. Es decir, cada átomo siente un potencial adicional debido al campo promedio de los otros átomos que se encuentran alrededor. Este potencial de interacción se introduce en la ecuación de Schrödinger y mediante la aproximación de campo promedio resulta una ecuación no-lineal de Schrödinger que se conoce como la ecuación de *Gross-Pitaevskii* [57, 58]. Como veremos en este capítulo, la parte no lineal de la interacción contiene un término de acoplamiento que es proporcional a la longitud de dispersión,  $a_s$ , de una onda- $s$  de dos bosones interactuando. En el límite fuertemente repulsivo (aproximación de Thomas-Fermi), la interacción no lineal es mucho más grande que la energía cinética, lo cual simplifica considerablemente la solución de la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP).

En este capítulo haremos una descripción sobre el formalismo que nos lleva a la ecuación de Gross-Pitaevskii, tanto en el caso estacionario como en el dependiente del tiempo. Esto nos permitirá calcular el estado base del CBE o el número de partículas que quedan atrapadas en los potenciales que provienen de las diferentes configuraciones que existen al formar guías de onda, y permiten manipular y guiar a las ondas de materia en chips atómicos (ver capítulo 3). Los potenciales de atrapamiento que usaremos para nuestros cálculos son cuatro: *un pozo cuadrado, armónico, doble armónico y triangular*. Por ser una ecuación no lineal resolveremos la ecuación de Gross-Pitaevskii numéricamente, para ello utilizamos el método de diferencias finitas. Posteriormente, compararemos la solución numérica de esta ecuación con la obtenida

en la aproximación de Thomas-Fermi. La comparación se hace para el pozo cuadrado por ser un caso especial en el cual se conoce la solución analítica reportada en la literatura [59].

## 4.2. Formalismo de la ecuación de Gross-Pitaevskii para un gas de $N$ bosones.

Existen varios métodos para tratar la ecuación de Gross-Pitaevskii para un condensado. Por ejemplo, se puede resolver mediante la aproximación de Hartree-Fock (HF) [60, 61], en términos de la matriz de densidad. Otra técnica es haciendo la formulación variacional. Nosotros optamos por el tratamiento variacional principalmente porque es la forma más sencilla para llegar a la ecuación de Gross-Pitaevskii.

Iniciamos considerando el hamiltoniano para un sistema de  $N$  bosones idénticos con masa  $m$ , y que se expresa de la siguiente manera [62]

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} w(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (4.1)$$

donde  $V(\vec{r}_i)$  es potencial externo o de confinamiento del sistema,  $w(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  es el potencial de interacción de dos cuerpos. Para un sistema de bosones consideramos la función de onda de muchas partículas

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(\vec{r}_i), \quad (4.2)$$

la función de onda  $\Psi$  consiste en el producto de las funciones de onda de cada partícula.

En un condensado, todas las partículas a temperatura  $T < T_c$  ocupan el mismo estado de energía cuántica, por lo tanto

$$|\Psi(\vec{r}_i)\rangle = |\Psi_i(\vec{r}_i)\rangle, \quad (4.3)$$

con  $i = 1, \dots, N$ . Además se cumple con la condición de normalización  $\langle \Psi_i(\vec{r}_i) | \Psi_i(\vec{r}_i) \rangle = 1$ . Calculamos el valor de expectación de la energía  $\langle E \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ , obtenemos

$$\langle E \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^N \Psi(\vec{r}_i) \left| \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\vec{r}_i) + \sum_{i<j} w(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right| \prod_{i=1}^N \Psi(\vec{r}_i) \right\rangle. \quad (4.4)$$

Separando los términos de energía cinética, potencial y de interacción de dos cuerpos tenemos de la ecuación anterior

$$\langle E \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \Psi_i | \frac{\hat{p}_i^2}{2m} | \Psi_i \rangle + \sum_{i=1}^N \langle \Psi_i | V(r_i) | \Psi_i \rangle + \sum_{i<j} \langle \Psi_i \Psi_j | w(r_i - r_j) | \Psi_i \Psi_j \rangle. \quad (4.5)$$

El último término del lado derecho contiene la integral de intercambio de Hartree-Fock [62]. Para determinar una función  $\Psi_i$  apropiada, esta debe de minimizar la energía,  $\delta E = 0$ , y que este sujeta a la condición de normalización.

Aplicamos los multiplicadores de Lagrange  $\epsilon_i$ , tal que

$$\delta \left[ E - \sum_{i=1}^N \epsilon_i (\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle - 1) \right] = 0, \quad (4.6)$$

sustituyendo la ecuación (4.5) en (4.6) podemos agrupar y separar la parte variacional correspondiente de los estados  $|\delta\Psi\rangle$  y  $\langle\delta\Psi|$ , simplificando tenemos que

$$\sum_{i=1}^N \langle\delta\Psi_i| \left[ \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \langle\Psi_j|w|\Psi_j\rangle - \epsilon_i \right] |\Psi_i\rangle + c.c. = 0, \quad (4.7)$$

donde el término *c.c.* (complejo conjugado) contiene el estado  $|\delta\Psi\rangle$ , y como la variación de  $\langle\delta\Psi|$  es ortogonal a  $|\delta\Psi\rangle$ , e independiente en el espacio dual, tenemos

$$\left[ \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \langle\Psi_j|w|\Psi_j\rangle \right] |\Psi_i\rangle = \epsilon_i |\Psi_i\rangle. \quad (4.8)$$

Esta es una ecuación de Schrödinger de campo promedio para  $N$  bosones. El tercer término del lado izquierdo es la contribución del campo promedio y está dado de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \langle\Psi_j|w|\Psi_j\rangle &= \sum_{j=1}^N \int w(\vec{r}_i - \vec{r}_j) |\Psi_j(r_j)|^2 d\vec{r}_j \\ &= N \int w(\vec{r}_i - \vec{r}') |\Psi(\vec{r}')|^2 d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (4.9)$$

En este último paso consideramos el hecho de que las partículas son idénticas y que además se encuentran en el mismo estado, es decir  $|\Psi_j(r_j)\rangle = |\Psi(\vec{r}')\rangle$ . Siendo  $\vec{r}'$  la posición asociada del campo promedio. Si desarrollamos la suma nos daremos cuenta que estaremos integrando  $N$  veces con la misma función de onda, por lo que el término de la suma se simplifica con el factor  $N$ . Como consecuencia tenemos que renormalizar a  $\Psi$  de la siguiente manera

$$\Psi_N(\vec{r}') = \sqrt{N} \Psi(\vec{r}'), \quad (4.10)$$

con la condición de normalización modificada a

$$\langle\Psi_N|\Psi_N\rangle = N. \quad (4.11)$$

De esta manera el factor  $N$  ya no aparece en la ecuación (4.9), y podemos reescribir el término del campo promedio de la forma siguiente

$$\sum_{j=1}^N \langle\Psi_j|w|\Psi_j\rangle = \langle\Psi_N|w|\Psi_N\rangle, \quad (4.12)$$

Si el potencial de interacción de dos cuerpos se considera como una pequeña variación, tal que este perturba debilmente a las partículas y su alcance es corto comparado con la extensión de la función de onda  $\Psi_N$ , tenemos la siguiente ecuación

$$\langle\Psi_N|w|\Psi_N\rangle = |\Psi_N(\vec{r}_i)|^2 \int w(\vec{r}_i - \vec{r}') d\vec{r}', \quad (4.13)$$

donde  $|\Psi_N(\vec{r}_i)|^2$  sale de la integral, puesto que su variación es muy pequeña en la región de integración y por lo tanto la evaluamos en la posición de la partícula  $i$ . Sustituyendo esta última ecuación en la (4.12) y a su vez en (4.8), tenemos que

$$\left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + |\Psi_N(\vec{r})|^2 \int w(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \right] \Psi_N(\vec{r}) = \epsilon \Psi_N(\vec{r}). \quad (4.14)$$

Como se puede ver, es la ecuación de Schrödinger no-lineal para el caso estacionario. El subíndice  $i$  se omite tomando el hecho de que las partículas son idénticas y que además se encuentran en el mismo estado  $|\Psi(r_i)\rangle = |\Psi(r)\rangle$ . Para la versión dependiente del tiempo se procede de la misma manera que se hizo para el caso estacionario pero ahora con el término  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  en lugar de  $\epsilon$ . Tenemos entonces la ecuación dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_N(\vec{r}, t) = \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + |\Psi_N(\vec{r}, t)|^2 \int w(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \right] \Psi_N(\vec{r}, t). \quad (4.15)$$

Para calcular el término de la integral  $w(\vec{r} - \vec{r}')$  consideremos la dispersión entre dos partículas con masas  $m_1$  y  $m_2$  separadas a una distancia  $\vec{r}$  sin atrapamiento ( $V(\vec{r}) = 0$ ). Así en el campo de dispersión  $w(\vec{r})$  la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + w(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon \Psi(\vec{r}), \quad (4.16)$$

donde  $\mu$  es la masa reducida. Si  $w(\vec{r}) = 0$ , se tiene como solución a una onda plana

$$\Psi_0(\vec{r}) = \phi_0 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (4.17)$$

Multiplicando por  $2\mu/\hbar^2$  la ecuación (4.16) y definiendo  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$  obtenemos

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} w(\vec{r}) \Psi(\vec{r}). \quad (4.18)$$

Esta es una ecuación de Helmholtz inhomogénea con  $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ , la cual se puede resolver con el método de la función de Green [33]. Buscamos una solución que describa la dispersión, es decir

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0 + \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} f(\theta, \varphi), \quad (4.19)$$

donde  $\Psi_0$  es la onda incidente y  $f(\theta, \varphi)$  es la amplitud de dispersión y está relacionada con el potencial de interacción  $w(\vec{r})$  mediante

$$f = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} w(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (4.20)$$

Empleando la primera aproximación de Born [63] en (4.20), donde la función de onda  $\Psi(\vec{r}') \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}$ , en la integral de (4.20) tenemos que  $\int w(\vec{r}') e^{i\vec{r}' \cdot (\vec{k} - \vec{k}')} d\vec{r}'$ , y considerando el caso de los átomos fríos tienen una temperatura  $T = 0$  su momento es  $k = 0$ , tenemos entonces la ecuación

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_B = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int w(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (4.21)$$



Por otro lado, del análisis de ondas parciales se tiene el resultado [63]

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l (e^{i\delta_l} - 1) P_l(\cos(\theta)) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l, \end{aligned}$$

donde  $P_l(\cos \theta)$  es el polinomio de *Legendre* de orden  $l$  y  $\delta_l$  es el desfase relativo causado por la interacción (corrimiento de fase) para el momento angular  $l$ . Tenemos que la contribución para las ondas esféricas,  $l = 0$ , en el límite cuando  $k \rightarrow 0$  es

$$f_{l=0} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{2ik} (e^{i\delta_0} - 1) \sin \delta_{l=0} = -a_{l=0},$$

donde  $a_{l=0} = a_s$  es la longitud de dispersión para el momento angular  $l = 0$  (onda- $s$ ). Esta se define como el "alcance efectivo" del potencial  $w(\vec{r})$ , puesto que en la aproximación de Born

$$\tan \delta_l \approx -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^{\infty} [j_l(kr')]^2 w(r') r'^2 dr'.$$

Suponiendo que  $l > 0$  no contribuye entonces reemplazamos este último resultado en (4.21) y llegamos a la siguiente expresión

$$\int w(\vec{r}') d\vec{r}' = a_s \frac{4\pi\hbar^2}{m}, \quad (4.22)$$

donde para un par de bosones de la misma especie consideramos la misma masa, es decir  $m_1 = m_2 = m$ , tenemos que la masa reducida es  $\mu = \frac{m^2}{2m} = \frac{m}{2}$ . La longitud de dispersión puede tomar los valores  $a_s > 0$  o  $a_s < 0$ , que indican si el potencial es repulsivo o atractivo, respectivamente. Sustituyendo la ec. (4.22) en la ecuación (4.15) y como  $\Psi_N = \sqrt{N}\Psi$ , tenemos la siguiente ecuación

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + U_0 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t), \quad (4.23)$$

donde  $U_0$  es una constante de acoplamiento que esta dada de la forma

$$U_0 = a_s \frac{4\pi\hbar^2}{m} (N - 1). \quad (4.24)$$

La ecuación (4.23) se conoce como la ecuación de Gross-Pitaevskii [57, 58]. La constante de acoplamiento tiene la característica de que es proporcional al número de átomos y a la longitud de dispersión  $a_s$ . El término  $N$  se recorre a  $N - 1$ . El propósito de esto es que cuando  $N = 1$  el término no lineal se hace cero y se recupera la ecuación de Schrödinger de un sólo átomo o partícula. El signo de la longitud de dispersión llega a ser muy importante cuando se considera la estabilidad de un CBE. Cuando  $a_s < 0$ , la colisión es una interacción atractiva entre las partículas. Cuando  $a_s > 0$ , la interacción es repulsiva. En una interacción atractiva

el condensado llega a ser inestable. Este tipo de atracción lleva a la compresión del gas, donde aumenta su densidad en el centro de la trampa que lo contiene, como consecuencia el condensado puede llegar a colapsar [64].

La ecuación independiente del tiempo se obtiene sustituyendo la ecuación (4.22) en la ecuación (4.15), de manera que obtenemos

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) + U_0|\Psi(\vec{r})|^2 \right] \Psi(\vec{r}) = \epsilon\Psi(\vec{r}). \quad (4.25)$$

Como mencionamos en el capítulo anterior (4.3), el centro de la guía de onda tiene un potencial armónico. Así para nuestros cálculos usaremos *unidades de oscilador armónico (u.o.)* que se define por el factor:  $a_{\perp} \equiv \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{1/2}$ , donde  $\omega_0$  es la frecuencia transversal de atrapamiento de la guía de onda y depende del campo magnético de la trampa. Para reescalar la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP) en la unidades del oscilador armónico hacemos el siguiente cambio de variable

$$\tilde{t} = \omega_0 t, \quad \vec{x} = \frac{\vec{r}}{a_{\perp}}, \quad \tilde{\Psi}(\vec{x}, \tilde{t}) = a_{\perp}^{3/2}\Psi(\vec{r}, t),$$

donde  $a_{\perp}$  es la longitud del oscilador armónico en el estado base.

Haciendo esto, obtenemos que la energía potencial en unidades de oscilador armónico es  $\tilde{V}(\vec{x}) = \frac{V(\vec{x})}{\hbar\omega_0}$  y sin pérdida de generalidad podemos quitar la tilde ( $\sim$ ), por lo que la ecuación de GP en unidades de oscilador armónico es de la forma

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\vec{x}) + g_{eff}|\Psi(\vec{x}, t)|^2 \right] \Psi(\vec{x}, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x}, t), \quad (4.26)$$

donde  $g_{eff} = 4\pi\frac{a_s}{a_{\perp}}(N-1)$  es la constante de acoplamiento en unidades de oscilador armónico. Haciendo el mismo procedimiento para el caso estacionario para la ecuación de GP tenemos

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\vec{x}) + g_{eff}|\Psi(\vec{x})|^2 \right] \Psi(\vec{x}) = \epsilon\Psi(\vec{x}), \quad (4.27)$$

donde  $\epsilon = \frac{\epsilon}{\hbar\omega_0}$  es la energía dada en unidades de oscilador armónico.

Los parámetros que dónde más bien usaremos corresponden al átomo de rubidio  $^{87}\text{Rb}$  con una masa de  $m = 1.44 \times 10^{-25}$  kg, la longitud del oscilador armónico  $a_{\perp} \approx 0.3407 \times 10^{-5}$  m, la frecuencia de la trampa  $\omega_0 = 20\pi$  rad/seg, la constante de Planck  $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$  Js, la longitud de dispersión para este átomo es de  $a_s = 5.1 \times 10^{-9}$  m [56] y la unidad atómica tiene el valor de 1 u.a. = 0.0520 nm [56]. La información acerca de la dispersión atómica es un ingrediente muy importante para obtener los condensados de Bose-Einstein. Se conoce la longitud de dispersión de los átomos alcalinos, por ejemplo, para el átomo de hidrógeno,  $a_s$  es 0.41 u.a. Para el isótopo de litio,  $^7\text{Li}$ , su longitud de dispersión es 33 u.a. [56]. El sodio,  $^{23}\text{Na}$ , tiene un  $a_s$  de 19.1 u.a. [56]. El potasio con sus isótopos se tiene los valores de  $a_s$ ,  $^{39}\text{K}$  es 140 u.a. [56] y  $^{41}\text{K}$  es 84 u.a. [56]. Para el rubidio,  $^{85}\text{Rb}$  y  $^{87}\text{Rb}$  tienen longitudes de dispersión de 2400 u.a. [56] y de 90 u.a. respectivamente.

### 4.3. Aproximación de Thomas-Fermi.

La aproximación de Thomas-Fermi consiste en considerar el límite fuertemente repulsivo para las interacciones entre átomos que forman un condensado, lo cual es una característica de los potenciales interatómicos obtenidos mediante el modelo de Thomas-Fermi. Esto tiene como consecuencia el predominio del potencial no lineal sobre la energía cinética, lo cual se refleja en despreciar el término de la energía cinética en la ecuación de Gross-Pitaevskii [65, 66, 67]. Físicamente lo que se observa es que los átomos que conforman el condensado de Bose-Einstein tienen energía cinética mucho más baja que el potencial externo  $V(\vec{x})$  y el potencial de interacción no lineal  $g_{eff}|\Psi_N|^2$ , debido a la baja temperatura en la que se encuentran, por lo que la nube de átomos del condensado puede tomarse como una densidad local y uniforme.

Cuando el condensado tiene un número grande de átomos la ecuación dependiente del tiempo de Gross-Pitaevskii admite una solución simple. Por ejemplo, en una dimensión, tomamos una función de prueba  $\Psi(x, t) = \Psi_{TF}(x)e^{-i\frac{\epsilon t}{\hbar}}$ , y haciendo la aproximación de Thomas-Fermi, tenemos

$$\left[ V(x) + g_{eff}^{TF} |\Psi_{TF}|^2 \right] \Psi_{TF}(x) = \epsilon \Psi_{TF}(x), \quad (4.28)$$

de aquí despejamos la función de onda

$$|\Psi_{TF}(x)|^2 = \frac{[\epsilon - V(x)]}{g_{eff}^{TF}}. \quad (4.29)$$

El perfil de densidad que se observa experimentalmente es, de esta forma, proporcional al potencial de confinamiento que lo contiene. Los condensados que actualmente se construyen contienen  $10^6$  átomos y aquí la aproximación de Thomas-Fermi es muy buena. También observamos que es inversamente proporcional a la longitud de dispersión y del número máximo de partículas puesto que:  $g_{eff} \propto a_s(N - 1)$ . De manera que podemos calcular el número máximo de átomos ligados en el potencial cuando  $\epsilon = 0$ . De otra forma cuando  $\epsilon > 0$  los átomos se empiezan a desligar del estado base y se empiezan a escapar del potencial. Por lo tanto la ecuación (4.29) se reduce a

$$|\Psi_{TF}(x)|^2 = \frac{[-V(x)]}{g_{eff}^{TF}}. \quad (4.30)$$

Es importante resaltar cuando el potencial de atrapamiento sea cero, es decir  $V(x) = 0$ , la función de onda  $\Psi_{TF}(x)$  se anula, esto es válido únicamente en la aproximación de TF puesto que hemos despreciado el término de la energía cinética. Escribimos esta ecuación de forma que podamos visualizar la constante de acoplamiento,  $g_{eff}^{TF}$ , en función del potencial de atrapamiento

$$g_{eff}^{TF} = \frac{-V(x)}{|\Psi_{TF}(x)|^2}. \quad (4.31)$$

Por lo tanto podemos encontrar en la aproximación de TF el número de átomos ligados en el estado base de un CBE para diferentes potenciales, los cuales forman las trampas en las guías de onda de un chip atómico. A continuación procederemos a hacer esto y en el siguiente capítulo obtendremos el número de átomos atrapados resolviendo numéricamente de la ecuación de Gross-Pitaevskii.

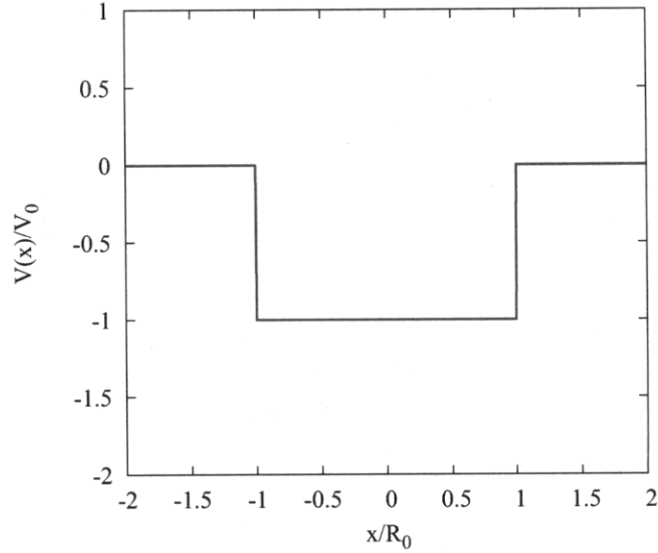


Figura 4.1: Potencial cuadrado. Para las regiones  $x < -R_0$  y  $x > R_0$ , las funciones de onda se anulan en el límite de Thomas-Fermi (TF) (ver ecuación 4.30), es decir  $\Psi_{TF}^I(x) = \Psi_{TF}^{III}(x) = 0$ . Los estados ligados se encuentran dentro del potencial. El máximo número se obtiene cuando el valor de la energía es  $\varepsilon = 0$ .

## 4.4. Potenciales de confinamiento en guías de onda de materia.

Nuestro objetivo principal en este trabajo es encontrar el número de átomos atrapados en una guía de onda de un chip atómico, los potenciales de atrapamiento que proponemos son cuatro: el de un pozo cuadrado, triangular, armónico y doble armónico. Los resultados que a continuación se presentan son para guías de onda en una dimensión. El criterio que tomamos es que el tamaño longitudinal de un CBE es mayor que su sección transversal. Ya que la forma del condensado se asemeja al potencial de confinamiento, como se puede observar en la figura 3.3 que tiene forma de un “cigarro”. De hecho y sin pérdida de generalidad, el perfil de la densidad del condensado puede ser aproximada a una dimensión.

### 4.4.1. Guía con potencial cuadrado.

Tenemos en primer lugar un potencial cuadrado que tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < R_0 \\ 0 & |x| > R_0. \end{cases} \quad (4.32)$$

Podemos distinguir tres regiones (ver figura 4.1). En estas regiones el CBE se mueve libremente en la guía. La región *I* corresponde valores a  $x < -R_0$  y la región *III* para valores de

$x > R_0$ . La región *II* define la trampa o región de confinamiento y además para nuestro caso tenemos  $\varepsilon = 0$ . Esto puede ser una esquina o curva de la guía  $Z$  o  $U$  por ejemplo.

De la condición de normalización tenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{TF}(x)|^2 dx = 1, \quad (4.33)$$

de forma que integramos cada una de las regiones

$$\int_{-\infty}^{-R_0} |\Psi_{TF}^I(x)|^2 dx + \int_{-R_0}^{R_0} |\Psi_{TF}^{II}(x)|^2 dx + \int_{R_0}^{\infty} |\Psi_{TF}^{III}(x)|^2 dx = 1. \quad (4.34)$$

Las funciones de onda en  $x < -R_0$  correspondiente a la región (I) y  $x > R_0$  de la región (III) se cumple para la aproximación de TF que  $\Psi_{TF}^I(x) = 0$  y  $\Psi_{TF}^{III}(x) = 0$ , puesto que el potencial en estas regiones es cero según (4.32) y de acuerdo con la ecuación (4.30) esto implica que la primera y la tercera integral sean cero<sup>1</sup>. Por lo tanto la función de onda que nos queda es de la región (II),  $\Psi(x) = \Psi_{TF}^{II}(x)$ , usando la ecuación (4.30) y sustituyendo el potencial  $V(x) = -V_0$ , obtenemos

$$\Psi_{TF}^{II}(x) = \left( \frac{V_0}{g_{eff}^{TF}} \right)^{1/2}. \quad (4.35)$$

Esta función de onda la reemplazamos en la segunda integral (4.34), y resolviendo llegamos la siguiente expresión

$$\Psi_{TF}^{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{2R_0}}. \quad (4.36)$$

De modo que  $\Psi_{TF}^{II}(x)$  es la función de onda normalizada cuando  $\varepsilon = 0$ . Reemplazando (4.36) en (4.31) y despejando  $(N - 1)$  proveniente de la constante de acoplamiento,  $g_{eff}^{TF}$ , obtenemos

$$(N - 1)R_0 = 2\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2. \quad (4.37)$$

donde  $\alpha = a_0/a_s 4\pi$ . Notese que la aproximación de TF nos dice que no hay onda de materia fuera de la trampa (estados estacionarios ligados y no hay tunelaje).

Sin embargo la ecuación de GP admite una solución analítica para este potencial cuadrado en una dimensión [59]. Esta solución considera el término de la energía cinética en la ecuación de GP y se expresa mediante una función de Jacobi elíptica. No entraremos en detalle de como se obtuvo dicha solución, solo mostraremos los resultados importantes para comparar nuestro método de TF y el método de diferencias finitas (MDF). La solución que representa estados parcialmente localizados se expresa de la forma

$$f_1(x) = -A \coth [k(x - b)] \quad (4.38)$$

$$f_2(x) = A_2 \operatorname{sn}(k_2 x + K(m)|m) \quad (4.39)$$

$$f_3(x) = A \coth [k(x + b)], \quad (4.40)$$

donde  $A$  corresponde a la amplitud para las regiones (I) y (III);  $A_2$  es la amplitud en la región (II). En la notación estandar  $\operatorname{sn}(x|m)$  representa funciones elípticas de Jacobi [68], donde  $m$

<sup>1</sup>En la ecuación de Schrödinger lineal esto no ocurre puesto que la aproximación de TF no se aplica.

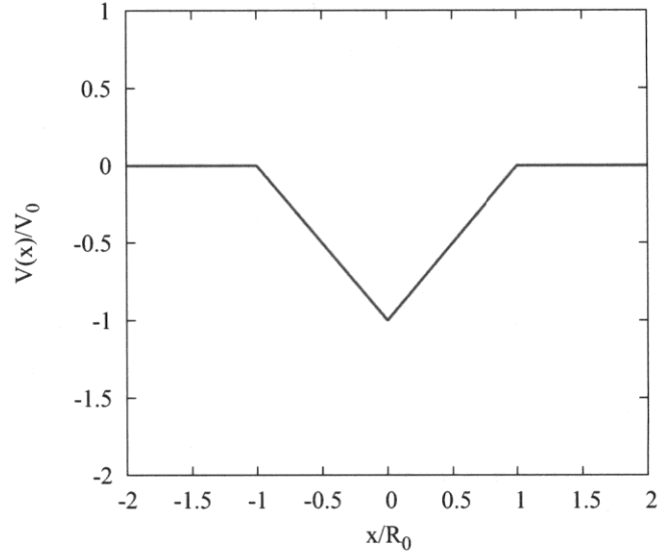


Figura 4.2: Potencial triangular. En la región *I*,  $x < -R_0$ , la función de onda se anula, en el límite de Thomas-Fermi  $\Psi_{TF}^I(x) = 0$  (ver ecuación 4.30), al igual que en la región *III*,  $x > R_0$ ,  $\Psi_{TF}^{III}(x) = 0$ . Los estados ligados se encuentran dentro del potencial, y cuando el valor de la energía es  $\varepsilon = 0$  se tiene el estado menos ligado y el máximo  $N$ .

es el parámetro elíptico. Este parámetro interpola las funciones elípticas de Jacobi entre las funciones trigonométricas e hiperbólicas.

A partir de estos resultados analíticos se encontró [69] una ecuación aproximada que relaciona el número de partículas ligadas en un pozo cuadrado mediante la relación:

$$g_{eff}(x) = \frac{x}{R_0} \left[ \sqrt{2} \left( \frac{e^{-\sqrt{2}x}}{1 + 2e^{-\sqrt{2}x} - e^{-2\sqrt{2}x}} \right) + 2x \right] \quad (4.41)$$

donde  $x = R_0\sqrt{V_0}$ . En el límite cuando  $x \gg 1$ , las exponenciales se pueden despreciar obteniéndose

$$g_{eff}(x) = \frac{2(R_0\sqrt{V_0})^2}{R_0}. \quad (4.42)$$

Esta ecuación coincide con la aproximación de Thomas-Fermi que encontramos para el caso del pozo cuadrado expresada en la ecuación (4.37).

La ecuación (4.37) y (4.42) tienen ciertas características similares que resulta por demás interesante, por ejemplo cada una contiene el factor  $N$  que representa el número de partículas ligadas a ese pozo; por otro lado depende de la profundidad y del ancho de la trampa.

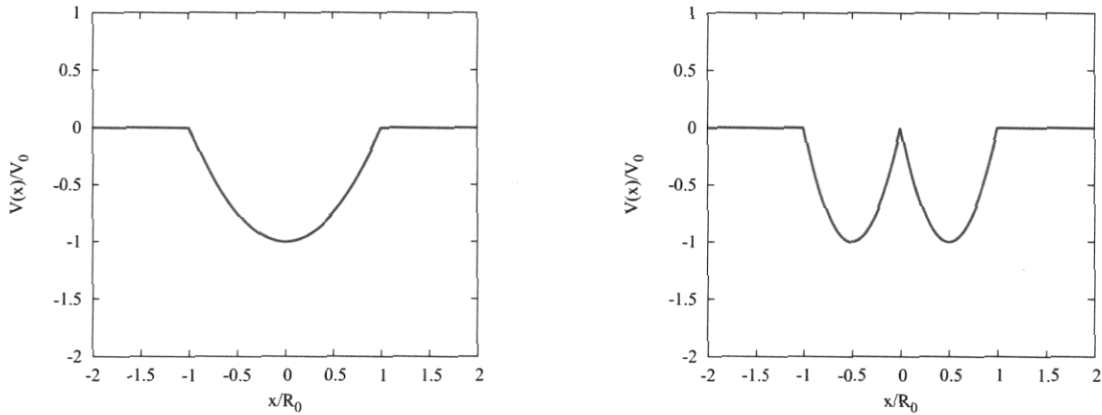


Figura 4.3: En el lado izquierdo tenemos el potencial armónico. En el lado derecho se observa el potencial doble armónico. Las regiones donde  $V(x) = 0$  no están permitidos para el límite de Thomas-Fermi (ver ecuación 4.30), por lo que las dos regiones que se encuentran dentro del intervalo  $-R_0 < x < 0$  y  $0 < x < R_0$  es donde quedan atrapados los átomos.

#### 4.4.2. Guía con pozo triangular.

El potencial triangular tiene tres regiones que están dadas por las siguientes condiciones

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \left( \frac{x}{R_0} + 1 \right) & -R_0 < x < 0 \\ -V_0 \left( \frac{x}{R_0} - 1 \right) & 0 < x < R_0 \\ 0 & |x| > R_0. \end{cases} \quad (4.43)$$

La forma de este potencial se puede observar en la figura 4.2. El análisis que se sigue es el mismo que realizamos en el pozo cuadrado. Básicamente se separan las tres regiones y se integra cada una de ellas. Imponiendo la condición del estado menos ligado, es decir,  $\varepsilon = 0$ . Nuevamente usamos la ecuación (4.30), resolvemos las integrales de (4.34) con las regiones que están determinadas en (4.43), el resultado que obtenemos es una expresión para el número de partículas atrapadas para el estado base que depende de  $V_0$  y el ancho  $R_0$  del pozo triangular, y está dada de la siguiente manera

$$(N - 1)R_0 = \alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2. \quad (4.44)$$

Para este potencial triangular no se le conoce resultado analítico alguno reportado en la literatura. Este tipo de potencial se puede observar en la guía de onda de forma **Y** que mencionamos en la sección 3.5 (ver figura 3.6), y que se utiliza para experimentos de interferencia [50].

### 4.4.3. Guía con pozo armónico y doble armónico.

El potencial armónico se define de la siguiente manera

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \left[ \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 - 1 \right] & |x| < R_0 \\ 0 & |x| > R_0 \end{cases} \quad (4.45)$$

Se tiene tres regiones para este potencial (ver el lado izquierdo de la figura 4.3), donde se anulan las funciones de onda en las regiones  $x < -R_0$  y  $x > R_0$ , es decir  $\Psi_{TF}^I(x) = \Psi_{TF}^{III}(x) = 0$ , el criterio que consideramos es mediante la ecuación (4.30). Quedando la región (II) para su análisis.

El potencial doble armónico tiene cuatro regiones (lado derecho de la figura 4.3) descritas de la siguiente manera

$$V(x) = \begin{cases} 4V_0 \left( \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 + \frac{x}{R_0} \right) & -R_0 < x < 0 \\ 4V_0 \left( \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 - \frac{x}{R_0} \right) & 0 < x < R_0 \\ 0 & |x| > R_0 \end{cases} \quad (4.46)$$

Las regiones (I) y (IV) correspondiente a  $x < -R_0$  y  $x > R_0$  en la aproximación de Thomas-Fermi, de acuerdo con la ecuación (4.30) las funciones de onda cumplen con la siguiente condición  $\Psi_{TF}^I = \Psi_{TF}^{IV} = 0$ . Las regiones (II), donde  $-R_0 < x < 0$ , y la región (III), donde  $0 < x < R_0$ , las funciones de onda no son cero. De nueva cuenta se resuelve bajo las mismas condiciones que el pozo cuadrado, y obtenemos los siguientes resultados, para el pozo armónico:

$$(N - 1)R_0 = \frac{4}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2, \quad (4.47)$$

para el pozo doble armónico:

$$(N - 1)R_0 = \frac{2}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2. \quad (4.48)$$

De las ecuaciones (4.37), (4.44), (4.47) y (4.48) podemos observar que el máximo número de átomos que se encuentran ligados en la trampa dependen explícitamente del ancho  $R_0$  y de la profundidad  $V_0$  del pozo. Para un valor fijo de  $R_0$  y  $V_0$  para los cuatro potenciales  $V_0$ , encontramos que el pozo cuadrado atrapa más partículas, le sigue el armónico, luego el triangular y finalmente el doble armónico con menos partículas.

En el siguiente capítulo resolveremos la ecuación de Gross-Pitaevskii con el método de diferencias finitas y compararemos nuestros resultados con la aproximación de Thomas-Fermi obtenidas en esta sección.



# Capítulo 5

## Solución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii.

### 5.1. Introducción.

Actualmente para muchos de los problemas de física que dependen del tiempo, o para un determinado fenómeno físico, nos planteamos un sistema de ecuaciones diferenciales parciales para su solución, válidas para determinada región e imponemos condiciones iniciales y de frontera apropiadas. Pero desafortunadamente sólo las formas más simples de algunas ecuaciones tienen solución analítica exacta. Para atacar los problemas más complejos, es necesario emplear métodos aproximados o numéricos, para los cuales es necesario desarrollar algoritmos computacionales apropiados. Tal es el caso de la ecuación no lineal de Schrödinger (NLS) que describe muchos fenómenos físicos; por ejemplo, aparece en diversos campos de óptica no lineal, en el estudio de ondas de gravedad en aguas profundas [70] o solitones en cristales líquidos [71]. También describe la dinámica de un condensado de Bose-Einstein (CBE), en donde se le conoce como la ecuación de Gross-Pitaevskii [57, 58] (ver capítulo 4).

En la parte de la solución analítica de la ecuación de GP, destaca el trabajo hecho por *L.D. Carr et al.* [59] quien fue el primero en encontrar soluciones para el caso estacionario en un pozo de potencial constante en una dimensión, como se mencionó en el capítulo 4, encontrando que las soluciones se expresan en términos de funciones elípticas de Jacobi. Por otro lado, *Seaman* [72] obtiene soluciones para el caso estacionario para un potencial atractivo tipo  $\delta(x - x')$ . En otro trabajo, *L.D. Carr et al.* [69], reportan una relación del número de átomos atrapados en un pozo cuadrado. Este pozo cuadrado representa una de las trampas en la guía de onda propuesta en este trabajo (ver sección 4.4). Las guías de onda es el canal por donde un CBE puede transportarse y/o manipularse en un chip atómico (ver capítulo 3).

En la actualidad existen una serie de trabajos en los que se resuelve la ecuación de GP de forma numérica, entre ellos se encuentra el trabajo de *W. Bao* [73] que usa el método espectral *time-splitting* para 1, 2 y 3 dimensiones. Por su parte, *H. Wang* [74] aplica el método *split-step* de diferencias finitas con potenciales de atrapamiento y estudia la dinámica de vórtices cuantizados en los CBE. El trabajo de *Trofimov y Peskov* [75] presenta un estudio sobre diferentes métodos utilizando diferencias finitas para resolver la ecuación de GP, como el *espectral, espectral con*

*iteraciones y Runge-Kutta*. La importancia de todos estos trabajos es que usan el método numérico de *diferencias finitas* obteniendo buenos resultados.

El método de diferencias finitas (MDF) [76, 77] consiste básicamente en trabajar bajo una representación de una red numérica en donde los puntos de la red estarán distribuidos uniformemente y cada punto representará las posiciones fijas tanto espacial como temporal de una función. Este método numérico permite obtener soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales, en donde la aproximación del MDF de las derivadas parciales asociadas a una función se construye mediante una serie de Taylor alrededor de un punto  $x_0$ . Con esto podemos asociar el valor de una función a un punto de la red.

Teniendo una vez la representación de diferencias finitas para las derivadas parciales, tanto espacial y temporal, el siguiente paso es incluir la evolución temporal de la ecuación de GP. El método de Crank-Nicholson (MCN) [74, 76, 77] resuelve este problema con la ventaja de que el resultado que obtenemos es una matriz tridiagonal. Es decir, el problema de una ecuación diferencial con derivadas parciales de primer y segundo orden, se reduce a un problema de álgebra matricial de dimensión  $N \times N$ , donde  $N$  es el número de puntos de la red. Nosotros usamos el MDF. Su ventaja radica en que es fácil de implementar y es estable. De esta manera resolvemos de forma numérica la ecuación de GP en una dimensión.

Nuestro trabajo es encontrar el número máximo de partículas atrapadas en una trampa de la guía de onda con diferentes potenciales de atrapamiento. De esta manera nuestros resultados numéricos usando el MDF son comparados con la aproximación de Thomas-Fermi (TF) (ver capítulo 4.3).

En este último capítulo describiremos el método numérico de diferencias finitas, su implementación en la ecuación de Gross-Pitaevskii, y como ejemplo de validéz de nuestro método resolveremos el problema de una partícula libre en forma de paquete Gaussiano que pasa por un potencial de pozo cuadrado con una anchura  $R_0$  y profundidad  $V_0$ , calculando así su coeficiente de transmisión y de reflexión.

## 5.2. Descripción del Método de Diferencias Finitas.

Consideremos una red numérica en donde podemos tener posiciones fijas y que pueden estar distribuidas uniformemente en el espacio-tiempo, esta representación se muestra en la figura 5.1. El concepto de la aproximación en diferencias finitas a sistemas que evolucionan con el tiempo, como la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, es que están representados en esta red numérica, donde cada punto de la red nos proporciona información de la evolución de nuestra función de onda  $\Psi(x, t)$ .

Si el valor de una función  $f(x, t)$  se asocia a un punto de la red, tenemos

$$f(x, t) \rightarrow f(x_k, t^{(n)}) \rightarrow f_k^n. \quad (5.1)$$

donde el subíndice  $k$  representa la  $k$ -ésima posición espacial fija  $x_k$ , mientras que el superíndice  $n$  indica el  $n$ -ésimo tiempo  $t^n$ . De ahora en adelante para un valor de la función  $f(x, t)$  en el punto  $(x, t)$ , se le asocia un punto  $(k, n)$  de la red (ver figura 5.1).

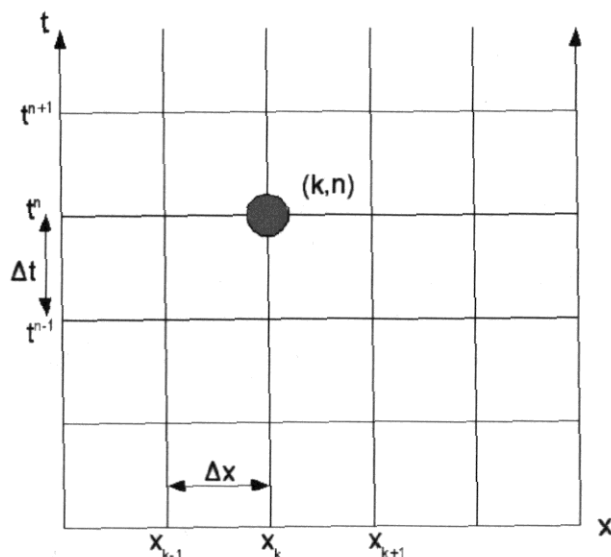


Figura 5.1: Red numérica. En este esquema se muestra un punto de una red numérica uniforme espacio-tiempo, con un espaciamiento  $\Delta x$  y  $\Delta t$ . El punto de la red está representado por  $k$  en la parte espacial y  $n$  en la parte temporal.

### 5.2.1. Derivadas parciales y temporales.

La ecuación diferencial que queremos resolver contiene derivadas parciales. Entonces construiremos la aproximación de diferencias finitas de las derivadas parciales usando la expansión de Taylor alrededor del punto  $x_0$ . Así para un punto hacia adelante  $x_0 + \Delta x$  y para un punto hacia atrás  $x_0 - \Delta x$  en la red, tenemos

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \Delta x + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \Delta x^2 + O(\Delta x^3) \quad (5.2)$$

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \Delta x + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \Delta x^2 + O(\Delta x^3). \quad (5.3)$$

De la ecuación (5.2) obtenemos a primer orden la derivada hacia adelante:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (5.4)$$

y de la ecuación (5.3) llegamos a la derivada hacia atrás:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (5.5)$$

Para obtener el término de la segunda derivada sumamos (5.2) y (5.3) a segundo orden con lo que nos queda la siguiente expresión

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x). \quad (5.6)$$

La igualdad se obtiene cuando tenemos el límite  $\Delta x \rightarrow 0$ . Ahora queremos representar a  $f(x)$  en un punto en la red y su incremento. La forma de expresarla en términos de nuestra red espacio-tiempo es:  $x_0 \rightarrow x_k$ , es un punto de interés en la red,  $x_0 + \Delta x \rightarrow x_{k+1}$ , un punto hacia adelante y  $\Delta x - x_0 \rightarrow x_{k-1}$  es un punto hacia atrás. La función en la representación de la red es  $f(x, t) \rightarrow f_k^n$ . Reescribiendo las ecuaciones (5.5) y (5.6) en esta representación discreta, tenemos

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_k} = \frac{f_{k+1} - f_k}{x_{k+1} - x_k} + O(\Delta x) \quad (5.7)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_k} = \frac{f_k - f_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} + O(\Delta x). \quad (5.8)$$

Para la segunda derivada en una red igualmente espaciada en  $x_{k+1}$ ,  $x_k$  y  $x_{k-1}$  se escribe de la siguiente forma

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_k} = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{(x_{k+1} - x_k)^2} + O(\Delta x). \quad (5.9)$$

Tenemos ahora, las derivadas parciales a primer y segundo orden en la aproximación de diferencias finitas. Para la diferencial temporal hacemos el mismo procedimiento, de manera que tenemos

$$f(t_0 + \Delta t) = f(t_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t_0} \Delta t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right)_{t_0} \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad (5.10)$$

$$f(t_0 - \Delta t) = f(t_0) - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t_0} \Delta t + \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right)_{t_0} \Delta t^2 + O(\Delta t^3). \quad (5.11)$$

Las derivadas a primer orden son

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t_0} \approx \frac{f(t_0 + \Delta t) - f(t_0)}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (5.12)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t_0} \approx \frac{f(t_0) - f(t_0 - \Delta t)}{\Delta t} + O(\Delta t). \quad (5.13)$$

Para un punto en la red:  $f(t) \rightarrow f^n$ , hacia adelante se expresa de la siguiente manera  $f(t_0 + \Delta t) \rightarrow f^{n+1}$  y hacia atrás  $f(t_0 - \Delta t) \rightarrow f^{n-1}$ . Las expresiones para las derivadas hacia adelante y hacia atrás en la red discreta son

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t^n} = \frac{f^{n+1} - f^n}{t^{n+1} - t^n} + O(\Delta t) \quad (5.14)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{t^n} = \frac{f^n - f^{n-1}}{t^n - t^{n-1}} + O(\Delta t). \quad (5.15)$$

Las ecuaciones (5.14) y (5.15) son las derivadas hacia adelante y hacia atrás en el punto  $t^n$ .

### 5.2.2. Integrales en diferencias finitas.

El hecho de que tengamos una representación para las derivadas parciales con el MDF, sugiere que también podemos hacerlo para la integración. Para la integral usamos la definición de Riemann

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{N-1} f_k(x_{k+1} - x_k). \quad (5.16)$$

Para la red uniforme espacio-tiempo,  $\Delta x$  es la diferencia entre el punto en la red y un punto hacia adelante  $\Delta x = x_{k+1} - x_k$ , sustituimos esta expresión en (5.16) obtenemos

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{N-1} f_k \Delta x. \quad (5.17)$$

Nos interesa la representación del MDF para la integración porque nos permite verificar que nuestra función de onda siempre este normalizada en todo tiempo; de esta forma nuestros resultados que obtenemos tendrán sentido físico. La integración en esta representación se muestra de forma detallada en el código de *Fortran 90* que se encuentra en el apéndice B.

## 5.3. Ecuación de Schrödinger lineal con MDF.

En la sección (5.2) explicamos el concepto del MDF y obtuvimos expresiones para las derivadas parciales de primer y segundo orden aplicando el teorema de Taylor. Ahora veremos una aplicación de este método a la ecuación que gobierna la mecánica cuántica: la ecuación de Schrödinger lineal. Analizaremos primero el caso independiente del tiempo, donde tenemos derivadas parciales de segundo orden en el espacio. Posteriormente estudiaremos la parte dependiente del tiempo, que además de tener derivadas parciales de segundo orden en la parte espacial se tiene una derivada parcial de primer orden en la parte temporal.

### 5.3.1. Caso I. Independiente del tiempo.

Tenemos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (5.18)$$

de manera que no hay derivadas parciales. Discretizamos la ecuación de Schrödinger usando la ecuación (5.9), que es la representación de diferencias finitas para la derivada parcial de segundo orden en el punto  $k$  de nuestra red numérica con espaciamiento uniforme  $\Delta x$ , tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\Psi_{k+1} - 2\Psi_k + \Psi_{k-1}}{(\Delta x)^2} \right] + V\Psi_k = E\Psi_k, \quad (5.19)$$

donde  $k = 1, \dots, N$ , donde  $N$  es el número de puntos en la red. Ahora debemos establecer las condiciones de frontera.

Como  $\Psi$  es de cuadrado integrable, es decir  $\Psi(x) \in \hat{\mathcal{L}}^2$ , y en la frontera la función de onda se anula. Es claro que con estas condiciones de frontera  $x = \pm\infty$ , para una computadora sería imposible hacer cualquier operación, por lo que debemos re-definir esas condiciones en el contexto de nuestra red numérica. Pedimos que nuestra función de onda se anule en el punto  $k = 0$  y en  $k = N + 1$ . Es decir el dominio de nuestra función de onda,  $\{-\infty, \infty\}$ , lo escribimos en términos de la red,  $[k = 0, k = N + 1]$ , donde  $N$  es el tamaño de la red. Ahora tiene sentido físico pedir que la función de onda se anule en  $k = 0$ , siendo el límite inferior y que se encuentra en el punto de inicio de la red, antes de este valor no existe la función de onda. De manera análoga en el punto  $k = N + 1$ , siendo  $N$  el límite superior, la función de onda se anula.

De aquí,  $\Psi_{k=0} = 0$  y  $\Psi_{k=N+1} = 0$ ; usando la ecuación (5.19) y las condiciones de frontera obtenemos para  $k = 1$  y  $k = N$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\psi_2 - 2\psi_1}{(\Delta x)^2} \right] + V_1 \psi_1 = E \psi_1 \quad (5.20)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{-2\psi_N + \psi_{N-1}}{(\Delta x)^2} \right] + V_N \psi_N = E \psi_N. \quad (5.21)$$

Las ecuaciones (5.19), (5.20) y (5.21) pueden ser expresadas matricialmente. Los elementos de la diagonal son

$$H_{i,i} = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_k. \quad (5.22)$$

Los elementos de la diagonal superior estan dados por

$$H_{i,i+i} = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2}, \quad (5.23)$$

y para la diagonal inferior tenemos

$$H_{i,i-i} = \frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2}. \quad (5.24)$$

Esto nos define una matriz para  $H$  de la forma tridiagonal simétrica

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & H_{32} & H_{33} & H_{34} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & H_{N-1,N-2} & H_{N-1,N-1} & H_{N-1,N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & H_{N,N-1} & H_{N,N} \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

y una representación vectorial para  $\Psi$  con elementos  $\Psi_k$ . Nótese que  $\mathbf{H}$  sólo depende de los puntos de la red y el potencial en los puntos.

Observamos que el problema original de encontrar la función de onda  $\Psi(x)$  a partir de una ecuación diferencial ha sido sustituido por el problema de resolver una ecuación matricial, una matriz de forma tridiagonal, para el conjunto discreto  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_k$ , es decir, en un problema de álgebra lineal

$$\hat{\mathbf{H}}\vec{\Psi} = E\vec{\Psi}. \quad (5.26)$$

Para encontrar los eigenvalores se resuelve el determinante secular

$$\det|\hat{\mathbf{H}} - E\mathbf{I}| = 0, \quad (5.27)$$

donde  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad y  $\hat{\mathbf{H}}$  es la matriz de  $N \times N$ . Esto nos da un polinomio de orden  $N$  con el mismo número de raíces para  $E$ . Encontrando las raíces del polinomio conocemos los eigenvalores y eigenvectores de (5.26). El número de eigenvectores y de eigenvalores es igual al número de puntos en la red  $N$ . Un punto muy importante que debemos mencionar es que el MDF nos brinda información acerca de los valores de la función en los puntos de la red, pero no proporciona información acerca de los valores de la función entre estos puntos. Mientras más puntos en la red tengamos más se reducirá el error que es de orden  $O(\Delta x^2)$ .

### 5.3.2. Caso II. Dependiente del tiempo.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (5.28)$$

que podemos expresarla en diferencias finitas mediante el uso de (5.9) y (5.14). Haciendo esto nos queda de la siguiente manera

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\Psi_{k+1}^n - 2\Psi_k^n + \Psi_{k-1}^n}{(\Delta x)^2} \right] + V\Psi_k^n = i\hbar \frac{\Psi_k^{n+1} - \Psi_k^n}{t^{n+1} - t^n}. \quad (5.29)$$

Para un incremento en el tiempo  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  queremos conocer la función de onda al tiempo  $t + \Delta t$ , es decir  $t^{n+1}$ . Reemplazamos  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  en la expresión anterior obtenemos

$$-\frac{\hbar\Delta t}{2mi\Delta x^2} \Psi_{k+1}^n - \frac{\hbar\Delta t}{2mi\Delta x^2} \Psi_{k-1}^n + \left[ -\frac{i\hbar\Delta t}{m\Delta x^2} - \frac{i\Delta t}{\hbar} V_k + 1 \right] \Psi_k^n = \Psi_k^{n+1}, \quad (5.30)$$

donde se despeja a  $\Delta t$  y factorizamos de lado izquierdo a la función de onda para un tiempo  $t^n$  y de lado derecho dejando a la función de onda para un tiempo posterior  $t^{n+1}$ .

La ecuación (5.30) es un ejemplo del método explícito, que significa que se tiene la solución de la función de onda a un tiempo posterior, en términos de la solución de la función de onda a un tiempo anterior. Por lo que podemos reescribirlo en forma matricial, teniendo que

$$\vec{\Psi}^{n+1} = \left[ \mathbf{I} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H} \right] \vec{\Psi}^n + O(\Delta t^2), \quad (5.31)$$

donde  $\mathbf{H}$  es la matriz tridiagonal del caso independiente del tiempo cuyos elementos están dados por las ecuaciones (5.22) a (5.24). Aquí  $\vec{\Psi}^{n+1}$  y  $\vec{\Psi}^n$  corresponden a vectores columna

$$\vec{\Psi}^n = \begin{pmatrix} \Psi_1^n \\ \vdots \\ \Psi_N^n \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

para el tiempo  $t^{n+1}$  y  $t^n$ .

Si observamos la ecuación (5.31) a los dos primeros términos de lado derecho se les puede relacionar con el operador de propagación temporal  $\hat{K}(t, t_0)$  a primer orden, es decir

$$\Psi(x, t) = \hat{K}(t, t_0)\Psi(x, t_0). \quad (5.33)$$

La función de onda para cualquier tiempo,  $t > t_0$ , se puede escribir en términos del propagador temporal

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{t-t_0}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}}\Psi(x, t_0). \quad (5.34)$$

Así, la ecuación (5.31) es la aproximación a primer orden de (5.34) en el MDF. Las ecuaciones (5.34) ó la (5.31), permiten evaluar la evolución de la función de onda a cualquier tiempo,  $t > t_0$ .

De particular interés es encontrar la función de onda para el estado base. El método que acabamos de describir se puede utilizar para esto. La idea se basa en pasar al método del tiempo imaginario, en donde es preciso hacer un cambio de variable en el tiempo quitando de manera explícita el término imaginario de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y obtener una ecuación de difusión. Esta ecuación de difusión nos permitira obtener la función de onda en el estado base y así evitar la inversión de una matriz de  $N \times N$  y calcular sus eigenvalores.

### 5.3.3. Ecuación de Schrödinger con tiempo-imaginario.

El método de tiempo imaginario consiste en hacer un cambio de variable de la siguiente forma:  $t = i\tau$  [78], en donde  $i$  corresponde a  $\sqrt{-1}$  y  $\tau$  el tiempo en el espacio imaginario. Mediante la regla de la cadena tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \frac{\partial}{\partial t} &= -i \frac{\partial}{\partial \tau}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Sustituimos esto en la ecuación (5.28), que corresponde a la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, \tau) = \hbar \frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau}, \quad (5.36)$$

donde pasamos de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo a una ecuación de difusión con coeficiente de difusión real. De aquí obtendremos la función de onda para el estado base a partir de la propagación temporal de la función de onda inicial.



La condición de normalización debe cumplirse para cada tiempo discreto  $t_k$ , además de cumplir con las condiciones de frontera en el límite de nuestra malla, es decir, la función de onda debe de anularse en  $\{-\infty, \infty\}$ . Para el caso del método del tiempo imaginario, las eigenfunciones decaen monótonicamente en el tiempo llegando a un estado de relajación. De la ecuación (5.31), la función de onda toma la forma, con el tiempo imaginario

$$\vec{\Psi}^{n+1} = \left[ \hat{I} - \frac{\Delta\tau}{\hbar} \hat{H} \right] \vec{\Psi}^n.$$

Cuando  $\Delta\tau \ll 1$  el operador  $\left[ \hat{I} - \frac{\Delta\tau}{\hbar} \hat{H} \right]$  es la aproximación a primer orden de  $e^{-\frac{\Delta\tau}{\hbar} \hat{H}}$  y se dice que la función de onda se difundirá a su estado de mínima energía que en nuestro caso corresponde al estado base.

## 5.4. Método de Crank-Nicolson.

El método de Crank-Nicolson (MCN) [74, 76, 77, 79] es un método de evolución temporal en diferencias finitas. Este método parte de la evolución temporal de la ecuación de Schrödinger que puede ser aproximado por la forma de Cayley [80, 81], que es la forma fraccional del operador de evolución  $e^{i\hat{H}t}$ ,

$$e^{i\hat{H}t} = \frac{1 - \frac{i}{2}\hat{H}t}{1 + \frac{i}{2}\hat{H}t} + O(t^3); \quad (5.37)$$

es decir, corrige a segundo orden la expansión a primer orden del operador exponencial. El método de Crank-Nicolson tiene la característica de que conserva la norma de la función de onda exactamente y computacionalmente es estable para tiempos largos.

Para reescribir la ecuación (5.34) usamos la relación de Baker-Campbell-Hausdorff [63], para separar operadores exponenciales,  $e^{\hat{A}+\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ . Siendo  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ ,  $\hat{A} = \hat{T}$  y  $\hat{B} = \hat{V}$ , donde  $\hat{T}$  y  $\hat{V}$  son los operadores de la energía cinética y potencial respectivamente, podemos escribir el término de la exponencial de la ecuación (5.34) de la siguiente manera

$$e^{\lambda\hat{T}+\lambda\hat{V}+\lambda^2[\hat{T},\hat{V}]} = e^{\lambda\hat{T}}e^{\lambda\hat{V}},$$

donde  $\lambda = \frac{-i\Delta t}{\hbar}$  y suponemos que  $\lambda^2[\hat{T}, \hat{V}]$  es despreciable particularmente para  $\Delta t \ll 1$ . Sustituyendo esta última expresión en la ecuación (5.34) obtenemos

$$\Psi(x, t) = e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{T}}e^{-i\frac{\Delta t}{\hbar}\hat{V}(x)}\Psi(x, t_0), \quad (5.38)$$

donde  $\Delta t = t - t_0$  es finito. Separamos el operador de la energía cinética mediante el método de *split-operator* [81], es decir, separamos la mitad del operador de la energía cinética a la izquierda y derecha de la ecuación (5.38); tenemos que

$$e^{\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}\Psi(x, t) = e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{V}(x)}\Psi(x, t_0), \quad (5.39)$$

definimos  $f(x, t, t_0) = e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{V}(x)}\Psi(x, t_0)$ , por lo que se simplifica la ecuación (5.39) de la siguiente manera

$$e^{\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}\Psi(x, t) = e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}}f(x, t, t_0). \quad (5.40)$$

Expandiendo a primer orden las exponenciales en ambos lados de la ecuación (5.40), obtenemos

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}\right)\Psi(x, t) = \left(1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar}\hat{T}\right)f(x, t, t_0). \quad (5.41)$$

Como se puede observar, esta es la forma de Cayley (5.37). Usando el operador de la energía cinética en términos de diferencias finitas, obtenemos

$$\begin{aligned} \{\Psi_k^{n+1} - \nu(\Psi_{k+1}^{n+1} - 2\Psi_k^{n+1} + \Psi_{k-1}^{n+1})\} = \\ \{f_k + \nu(f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1})\}, \end{aligned} \quad (5.42)$$

en donde  $\nu = \frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta x^2}$ . En forma matricial se tiene

$$\mathbf{A}^{(+)}\vec{\Psi}^{n+1} = \mathbf{A}^{(-)}\vec{f}, \quad (5.43)$$

la cual es una ecuación implícita. Despejando para la función de onda

$$\vec{\Psi}^{n+1} = (\mathbf{A}^{(+)})^{-1}\mathbf{A}^{(-)}\vec{f}. \quad (5.44)$$

Este es el método implícito de Crank-Nicholson, en donde ambos lados de la ecuación dependen del tiempo final de evolución. Las matrices  $\mathbf{A}^{(+)}$  y  $\mathbf{A}^{(-)}$  son matrices tridiagonales simétricas con elementos definidos de la siguiente manera

$$\begin{aligned} A_{i,i}^{\pm} &= 1 \pm 2\nu \\ A_{i,i+1}^{\pm} &= \mp\nu \\ A_{i,i-1}^{\pm} &= \mp\nu \end{aligned} \quad (5.45)$$

y la matriz tridiagonal tiene la forma

$$\mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu \end{pmatrix}. \quad (5.46)$$

Nótese ahora que  $\mathbf{A}^{(\pm)}$  sólo depende de la red. El potencial está en la forma exponencial en  $\vec{f}$ . Para invertir  $\mathbf{A}^{(+)}$  se hace mediante el método LU de inversión [82, 83]. Este método consiste en resolver un sistema de la forma  $\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , donde la matriz  $\mathbf{M}$  se puede escribir como el producto de dos matrices:  $\mathbf{M} = \mathbf{L}\mathbf{U}$ , siendo  $\mathbf{L}$  una matriz triangular inferior y  $\mathbf{U}$  una matriz triangular superior. Por lo que ahora nuestro problema se reduce a invertir una matriz tridiagonal.

## 5.5. Prueba numérica: propagación de un paquete Gaussiano.

Para comprobar nuestro método numérico, se analizan los estados de dispersión de una partícula libre,  $E > 0$ , que se propaga de izquierda ( $x = -\infty$ ) hacia la derecha ( $x = \infty$ ) y que pasa por un pozo cuadrado de anchura  $R_0$  y profundidad  $-V_0$  [81] y compararemos nuestros resultados con la solución analítica [63, 84]. El pozo de potencial tiene la forma

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < R_0 \\ 0 & |x| \geq R_0 \end{cases} \quad (5.47)$$

Las soluciones analíticas para el caso estacionario están dadas de la siguiente manera

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x} & x \leq R_0 \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} & R_0 \leq x \leq -R_0 \\ Fe^{i\kappa x} & x \geq R_0 \end{cases} \quad (5.48)$$

donde

$$k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar \quad \kappa = \sqrt{2mE}/\hbar. \quad (5.49)$$

De estas soluciones podemos encontrar el coeficiente de transmisión  $T$  y el de reflexión  $R$  dados de la siguiente forma

$$T = 1 - \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left( \frac{2R_0}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right) \quad (5.50)$$

$$R = \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left( \frac{2R_0}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right). \quad (5.51)$$

Sabemos que el paquete de onda, cuando encuentra un potencial atractivo (pozo cuadrado) o repulsivo (escalón), tendrá una parte reflejada y otra que se transmite, y que podemos calcularla de forma analítica usando las ecuaciones (5.50) y (5.51). En forma numérica se resuelve la ecuación diferencial proponiendo una función de onda  $\psi(x, t_0)$  que se propagará en el tiempo aplicando el método de Crank-Nicolson y usando las expresiones en diferencias finitas para las derivadas parciales de primer y segundo orden, para obtener una matriz tridiagonal que se resuelve mediante el método de álgebra lineal **LU**.

El algoritmo que seguiremos para resolver el problema numéricamente, se resume en tres pasos:

Paso 1. *Estructura de la red numérica.* Con esto nos referimos al tamaño de nuestra malla. Definimos un tiempo mínimo  $t_{min}$  y tiempo máximo  $t_{max}$ ; así como la longitud de la red en el espacio definiendo un  $x_{min}$  y  $x_{max}$ . Recordemos que esta red numérica en cada punto tendrá información de la función de onda tanto espacial como temporal  $\psi(x, t) \rightarrow \psi_k^n$ . En nuestro ejemplo, aplicaremos este método a dos casos de la propagación de un paquete de onda Gaussiano; el primer caso es un paquete con una anchura de  $w = 10.0$  u.a. y el segundo caso con  $w = 50.0$  u.a. de ancho. Así, tendremos un paquete de onda muy ancho y otro muy angosto y compararemos los resultados.

En este ejemplo usamos unidades atómicas (u.a.), tomando la masa de la partícula como la unidad y  $\hbar = 1$ . Para el primer caso el paquete de onda Gaussiano tenemos que el tamaño de la red,  $N$ , tiene 4000 puntos que se distribuyen desde  $x_{min} = -200$  u.a., hasta  $x_{max} = 200$  u.a., con un espaciamiento uniforme  $\Delta x = 0.1$  u.a., que se determina mediante la relación  $\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N}$ . El incremento temporal  $\Delta t = 0.1$  se escoge de tal manera que  $\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} < 1$ , para que la ecuación (5.42) converja. Aunque para este caso el valor de  $\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}$  es mayor que uno, pero la aproximación de Cayley nos garantiza estabilidad y con este valor una convergencia rápida. Por esta razón optamos, en este caso, por este valor. La anchura del pozo es de  $R_0 = 5.0$  u.a., en el eje  $x$ . Para el segundo caso el paquete de onda Gaussiano tenemos una red de  $N = 8000$  puntos que se distribuyen desde  $x_{min} = -400$  u.a., hasta  $x_{min} = 400$  u.a., con un incremento temporal de  $\Delta t = 0.03$  u.a., siendo  $\Delta x = 0.1$  u.a., la anchura del pozo no cambia con un valor de  $R_0 = 5.0$  u.a.

tmin	tmax	dt	xMin	xMax	xNumPoints
0.0	tmax	0.1/0.03	-200/-400	200/400	4000/8000
Masa	V0	R0	g0	Width	Vel
1.00	-1.00	5.00	-65.00/-200.0	10.0/50.0	$v$

Tabla 1. Datos de entrada para el código de *Fortran 90* para calcular  $T$  y  $R$ ,  $v$  toma los valores inicialmente de  $v = 0.2$  u.a., hasta alcanzar una velocidad de  $v = 2.6$  u.a., con un incremento de 0.1 en las velocidades para los casos con  $w = 10.0$  u.a. y para  $w = 50.0$  u.a..

Paso 2. *Función de onda inicial*. Proponemos una función de onda inicial  $\psi(x, t_0)$  que tiene forma de un paquete de onda gaussiano

$$\psi(x, t_0) = \exp \left[ - \left( \frac{x - x_0}{w} \right)^2 + i\kappa_0 x \right]. \quad (5.52)$$

Usamos el paquete de onda Gaussiano porque, mediante una transformada de Fourier (serie), es una superposición de ondas planas para diferentes valores de  $\hbar k$  y de los correspondientes valores de la energía  $\hbar^2 k^2 / 2m$ . De la ecuación (5.52) tenemos que el paquete de onda está centrado en  $x_0$ , cuyo ancho es  $w$  y  $k_0$  es el vector de onda que es proporcional a la velocidad. En nuestro caso particular consideramos dos casos: en el primero  $w = 10$  u.a., y  $x = -65$  u.a.; en el segundo  $w = 50$  u.a. y  $x = -200$  u.a. Estos datos están dados en la tabla 1.

Paso 3. *Implementación del código en FORTRAN 95*. En este paso incluye el MDF y del MCN, que se implementan en un código en lenguaje *Fortran 90*. La descripción del programa se encuentra en el apéndice A.

En el código damos la velocidad, puesto que  $mv = p \equiv \hbar k$ . Así la velocidad de la partícula toma valores de  $v = 0.2$  u.a., hasta  $v = 2.6$  u.a., con incremento de 0.1 u.a., teniendo 25 velocidades diferentes. El parámetro del tiempo máximo,  $t_{max}$ , se recalcula cada vez que cambiamos la velocidad, para cada  $v$  le corresponde a un tiempo máximo que se determina de la relación  $vel = distancia / t_{max}$ . La distancia esta determinada por el tamaño de la red. Para el primer caso, el paquete de onda con una anchura de  $w = 10.0$  u.a., se puede centrar en  $x_0 = -65.0$  u.a., debido a que su perfil es pequeño en comparación del tamaño de la malla. En cambio,

para el segundo caso, el paquete de onda con  $w = 50.0$  u.a., se centra en  $x = -200.0$  u.a., y aumentamos el tamaño de la red, esto para evitar reflexiones no físicas de la función de onda en las paredes de la red.

Para cada caso del paquete de onda gaussiano se calculó  $T$  y  $R$ , variando la velocidad. Para el coeficiente de transmisión, numéricamente se resuelve pidiendo que se nos proporcione los valores de la función de onda normalizada,  $|\psi(x, t)|^2$ , en la región  $x > R_0$ . En el código se encuentra indicado con la instrucción *NormaT* (ver apéndice A). El coeficiente de reflexión es el valor de la función de onda normalizada en la región  $x < -R_0$ , en donde la instrucción para  $R$  en el código es *NormaR* (ver apéndice A).

La suma del módulo cuadrado de los coeficientes de transmisión y de reflexión cumple con la condición  $|R|^2 + |T|^2 = 1$ , esto es porque para todo tiempo  $|\psi(x, t)|^2 = 1$ , es decir siempre esté normalizada. La transmisión  $T$  es función de energía de la partícula, siendo esta la energía cinética  $E = \frac{mv^2}{2}$ ; esta velocidad se asocia con la magnitud del vector de onda  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Si la partícula tiene una velocidad  $v \ll 1$  esta no se transmite para una profundidad del pozo de  $V_0 = -1.0$  u.a. Como vayamos incrementando su velocidad hasta alcanzar  $v > 1$ , con la misma profundidad del pozo  $V_0 = -1.0$  u.a., se empieza a transmitir y una parte se empieza a reflejar.

Los resultados numéricos obtenidos para estas condiciones se observan en la gráfica 5.2 que corresponde a la transmisión y para la reflexión la gráfica 5.3. Los datos para  $T$  y  $R$  se muestran en función de la velocidad al cuadrado. La línea continua en ambas gráficas corresponde a la solución analítica y los puntos a la solución con el MDF. Se consideraron 25 valores de velocidades distintas, para una anchura del pozo  $R_0 = 5.0$  u.a., y  $V_0 = -1.0$  u.a., constantes. Para velocidades igual o mayor que  $v = 2.6$  u.a., la partícula tiene una energía cinética muy grande pasando sobre el pozo de forma completa,  $T \rightarrow 1$ . En este caso no hay reflexión ya que  $R \rightarrow 0$ .

Para el primer caso el paquete gaussiano con anchura  $w = 10.0$  u.a., notamos que los máximos y mínimos no coinciden tanto para  $T$  y  $R$ . Esto se puede entender de la siguiente manera. Como un paquete de onda gaussiano se puede expresar de la siguiente manera

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int \phi(k_x) e^{-i(k_x x - \omega t)} dk_x,$$

donde  $\phi(k_x)$  es la amplitud del paquete en el espacio de momentos. Si la partícula es libre, la velocidad de grupo es  $v_g \equiv \hbar k_0/m$ ; por la relación de la longitud de onda de de Broglie, no es más que la velocidad de una partícula de masa  $m$  asociada a la longitud  $\lambda_0 \equiv 2\pi/k_0$ . Por lo tanto, para un paquete de ondas se asocia la velocidad de una partícula con la velocidad de grupo. De manera que para el primer caso el paquete de onda con anchura  $w = 10.0$  u.a., en el espacio de momentos se puede localizar a la partícula en una región con lo que contribuye con una  $\Delta k$  mayor. Esto tiene como consecuencia que los máximos y los mínimos no coinciden con el resultado analítico (ver las figuras 5.2 y 5.3). En cambio, para el segundo caso el paquete de onda gaussiano con  $w = 50.0$  u.a., se puede localizar a la partícula en el espacio de momentos en una región más pequeña, así,  $\Delta k$  es menor y asemeja mejor al resultado de una sola onda plana. En este caso se observa que los puntos cuadrados, que son los datos obtenidos con el MDF, se apegan más a la solución analítica.

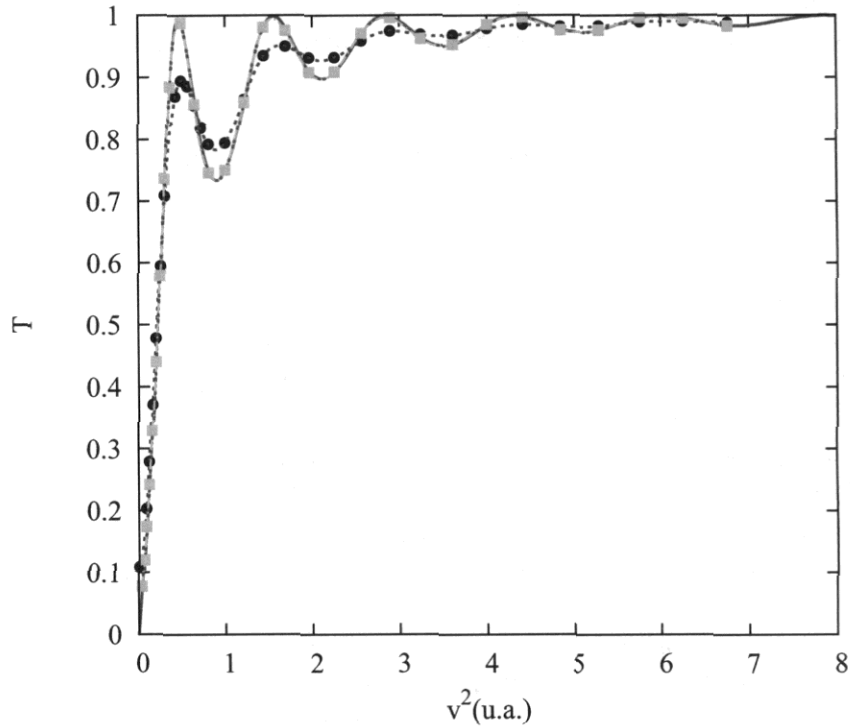


Figura 5.2: Coeficiente de transmisión de una partícula pasando por un pozo de potencial  $V_0 = -1.0$  u.a., como función del cuadrado de la velocidad inicial del paquete. La línea continua es la solución analítica, los círculos son los datos obtenidos con MDF para el primer caso, paquete gaussiano con  $w = 10.0$  u.a. Los cuadrados corresponden al segundo caso, paquete gaussiano con una anchura de  $w = 50.0$  u.a.

Para complementar esta prueba numérica, en la figura 5.4 se muestra la evolución del paquete de onda gaussiano con ancho  $w = 10.0$  u.a., que pasa sobre un pozo de profundidad  $V_0 = -1.0$  u.a., y de ancho  $R_0 = 5.0$  u.a. La partícula se mueve de izquierda a derecha con una velocidad de  $v = 0.55$  u.a. Inicialmente la partícula se encuentra a  $t = 0.0$  u.a. (figura 5.4(a)), para los tiempos  $t = 175.0$  u.a. (figura 5.4(b)) y  $t = 195$  u.a. (figura 5.4(c)) el paquete de onda interactúa con el pozo. En el tiempo  $t = 215$  u.a., el paquete se encuentra atravesando el pozo y se puede observar un pico muy pronunciado (figura 5.4(d)), debido a que hay una probabilidad de encontrar a la partícula a la derecha (transmisión), haciendo que se superpongan formando un patrón de interferencia. Para el tiempo  $t = 225$  u.a., (figura 5.4(e)) se puede ver como se desprende en dos partes el paquete inicial. En los tiempos  $t = 250$  u.a. (figura 5.4(f)),  $t = 265$  u.a. (figura 5.4(g)), y  $t = 320$  u.a. (figura 5.4(h)), se ve claramente la probabilidad de que la partícula se transmita, que viaja hacia la derecha, y una probabilidad que se refleje, que se dirige hacia la izquierda. Para  $t = 380$  u.a. (figura 5.4(i)) el paquete de onda pasa por completo el pozo, vemos la probabilidad de transmisión y de reflexión de la partícula. Encontramos que los valores para los coeficientes de transmisión y reflexión son de  $T = 0.70$  y  $R = 0.29$ ,

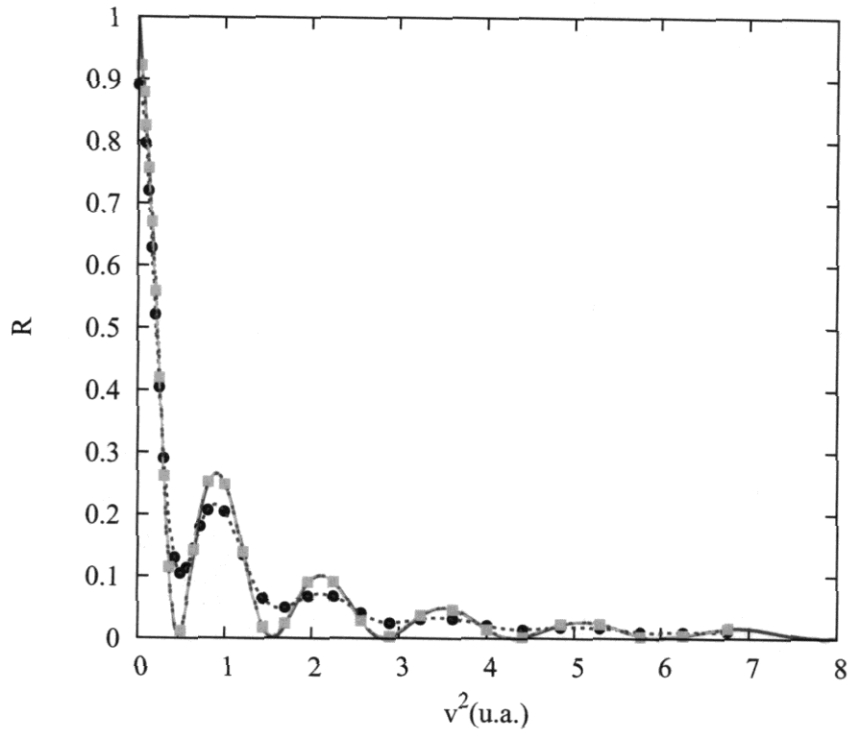


Figura 5.3: Coeficiente de reflexión de una partícula que pasa por un pozo de potencial  $V_0 = -1.0$  u.a., como función del cuadrado de la velocidad inicial del paquete. La línea continua es la parte analítica, los círculos son los datos obtenidos con MDF para el primer caso, paquete gaussiano con  $w = 10.0$  u.a. Los cuadrados corresponden al segundo caso, paquete gaussiano con una anchura de  $w = 50.0$  u.a.

respectivamente.

Como se puede notar de nuestros resultados el MDF es un camino viable para resolver la ecuación de Schrödinger y hacer la propagación de su función de onda. Ahora extenderemos este método a la ecuación de GP en la siguiente sección.

## 5.6. Potenciales de confinamiento en guías de onda de materia.

Una vez que ya hemos probado el MDF en problemas de dispersión, procedemos a atacar el problema de interés. Así aplicamos el MDF a la ecuación de GP para cuatro tipos de trampas en guías de onda de materia en una dimensión que ya mencionamos en la sección 4.4, siendo éstos los siguientes: pozo cuadrado, pozo triangular, pozo armónico y un pozo doble armónico. El potencial de la ecuación de GP lo conforman dos términos. El primer término,  $V(x)$ , corresponde al potencial de la guía de onda, que tiene la forma de la trampa en donde es guiado el condensado

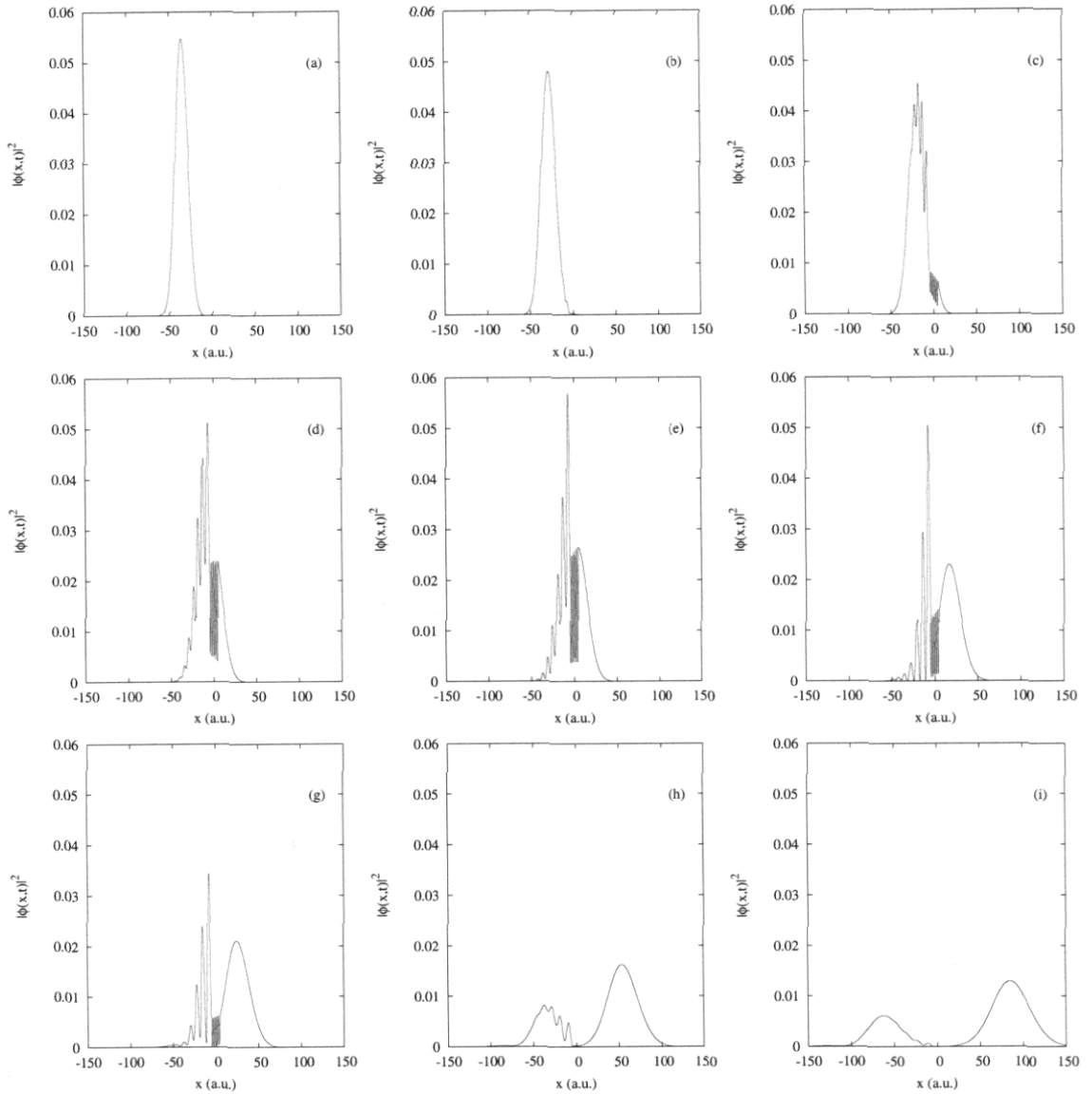


Figura 5.4: Dispersión de un paquete de onda gaussiano que viaja de derecha a izquierda. El pozo tiene una profundidad de  $V_0 = -1.0$  u.a., y ancho  $R_0 = 5$  u.a. La onda se mueve con una velocidad de  $v = 0.55$  u.a. Con tiempos  $t = 0.0$  u.a. (cuadro (a)),  $t = 175.0$  u.a. (cuadro (b)),  $t = 195.0$  u.a. (cuadro (c)),  $t = 215.0$  u.a. (cuadro (d)),  $t = 225.0$  u.a. (cuadro (e)),  $t = 250.0$  u.a. (cuadro (f)),  $t = 265$  u.a. (cuadro (g)),  $t = 320$  u.a. (cuadro (h)), y  $t = 380$  u.a. (cuadro (i)).

de Bose-Einstein sobre el chip atómico. El segundo término  $g_{eff}|\Psi_N|^2$ , es consecuencia de las interacciones binarias entre bosones (ver capítulo 4) y contiene la longitud de dispersión y el número de partículas del condensado, es decir  $g_{eff} \propto a_s(N - 1)$ . La razón principal de esto es que el MDF incluye la energía cinética en la ecuación de GP a diferencia de la aproximación



de TF.

La metodología que seguimos para resolver la ecuación de GP usando el MDF es similar a la sección anterior, excepto que usamos el tiempo imaginario que vimos en la sección (5.5), donde la ecuación (5.36) para tiempos muy largos,  $t \gg 1$  hace que la función de onda se difunda obteniendo la función de onda en el estado base, es decir  $\Psi(x, t) \rightarrow \Psi_0(x, t)$ . Conociendo la manera de obtener  $\Psi_0(x, t)$  mediante el tiempo imaginario, resolvemos discretizando el espacio y tiempo mediante una red o malla numérica. Aplicamos la representación de derivadas parciales en el espacio y tiempo a la ecuación (5.36) y usamos los métodos de *split-operator* y el MCN (ecuaciones (5.41) y (5.42)). En el término de la expresión (5.41) del lado derecho,  $f(x, t, t_0)$ , contiene ahora el potencial de la guía de onda y la parte no lineal de la ecuación de GP. Al final obtenemos una matriz tridiagonal que se resuelve mediante la inversión LU.

En la tabla 2 se muestran los datos de entrada para el código en *Fortran 90* (ver apéndice B). Los datos corresponden al isótopo de rubidio 87, en la aproximación de TF, ( $^{87}\text{Rb}$ ) que tiene una masa de  $m = 87m_p$  u.m.a. Una longitud de dispersión  $a_s = 100$  u.a., valor para este átomo alcalino [56]. Nuestra red numérica consta de 2000 puntos que van de  $x_{min} = -200$  u.o., hasta  $x_{max} = 200$  u.o. en el espacio, donde usamos *unidades de oscilador* (u.o.) que definimos en la sección (4.2). Teniendo un espaciamiento uniforme en  $x$  de  $\Delta x = 0.2$  u.o. Para la frontera de la malla temporal tenemos  $t_{min} = 0$  u.o.,  $t_{max} = 800$  u.o. y  $\Delta t = 0.01$  u.o. Como función de onda inicial usamos un paquete Gaussiano con un ancho de  $w = 1.0$  u.o., centrado en el centro de la trampa.

tmin	tmax	dt	xMin	xMax	dx	error
0.0	3000.0	0.01	-200.0	200.0	0.2	1.0d-8
masa	V0	R0	Width	$a_s$	$a_0$	$N$
$87m_p$	$-V_0$	$R_0$	1.0	100.0	51923.0	$N_{max}$

Tabla 2. Datos de entrada que se dan en el código hecho en *Fortran90* (ver apéndice B) para resolver la ecuación de GP, en la aproximación de TF, con el MDF. Donde  $N_{max}$  es el número de partículas ligadas dentro del potencial. Para cada valor del potencial  $-V_0$ , variamos  $R_0$  y buscamos  $N_{max}$  tal que  $\varepsilon = 0$ .

El valor de  $\Delta t$  se modificó respecto al ejemplo anterior,  $\Delta t = 0.1 \rightarrow \Delta t = 0.01$  u.o., debido a que necesitábamos mejorar la precisión numérica. Para tener mejor precisión numérica podemos incrementar el número de puntos en la red. El criterio que tomamos para cambiar  $\Delta t$  fue el valor del factor  $\nu = \frac{\Delta t}{4\Delta x^2} < 1$ , que se obtiene de la ecuación (5.42) al usar el método de Crank-Nicolson y el método del tiempo imaginario. Después de un análisis del valor de  $\Delta x$ , encontramos que el valor de  $\Delta t = 0.01$  u.o., es el más adecuado. Siendo la precisión numérica del orden de  $10^{-8}$  u.o., en el cálculo de la suma de la energía cinética y energía potencial.

Para un valor dado de  $V_0$ , variamos la anchura del pozo  $R_0$ . Los valores utilizados de  $V_0$  y  $R_0$  fueron los mismos para los cuatro potenciales. Los valores que tomamos para la profundidad del pozo  $V_0$  son  $V_0 = -0.005$  u.o.,  $V_0 = -0.001$  u.o.,  $V_0 = -0.1$  u.o.,  $V_0 = -0.5$  u.o.,  $V_0 = -1.0$  u.o.,  $V_0 = -2.0$  u.o.,  $V_0 = -3.0$  u.o.,  $V_0 = -4.0$  u.o., y  $V_0 = -5.0$  u.o. Para el ancho del pozo,  $R_0$ , se tomaron los siguientes valores  $R_0 = 1$  u.o.,  $R_0 = 2$  u.o.,  $R_0 = 3$  u.o.,  $R_0 = 4$  u.o. y  $R_0 = 5$  u.o.

En los datos de salida del programa tenemos la normalización de la función de onda, la energía cinética, la energía potencial y la suma de estas dos energías. Si la energía total, es decir, la suma de la energía cinética y potencial es negativa corresponde a un estado ligado. El número de partículas del condensado,  $N$ , es un dato de entrada para el código (ver tabla 2) y está contenido en el término de la energía potencial (segundo término de la izquierda de la ecuación 5.36), de esta manera, para cada número de partículas que damos en los datos de entrada obtenemos un valor de la energía total. Es decir, si para un número  $N$  de partículas (CBE) la energía total es negativa, la onda de materia se encuentra dentro del potencial, y si para el siguiente número de partículas,  $N + 1$ , la energía total es positiva y significa que el CBE se encuentra desligado. De esta manera encontramos el número máximo de partículas,  $N_{max}$ , que se encuentran dentro de una trampa de la guía de onda.

## 5.7. Resultados.

Teniendo la implementación numérica y los cuatro potenciales de atrapamiento, donde usamos unidades de oscilador armónico (u.o.) que definimos en la sección (4.2), presentamos nuestros resultados obtenidos para el número de átomos atrapados en el estado base usando el MDF. Los resultados numéricos obtenidos por el MDF se comparan con la aproximación de Thomas-Fermi (TF) y en su caso con la solución analítica existente (pozo cuadrado). Tomamos en consideración dos casos, el primer caso corresponde a la aproximación de TF usando el MDF. Para el segundo caso, resolvimos la ecuación de GP con el MDF, y comparamos los datos obtenidos con la solución analítica aproximada (SAA) para el pozo cuadrado (vease 4.4.1).

**Primer caso.**  $g_{eff} \gg 1$ . Para este primer caso tomamos el valor de la masa de  $m = 87m_p$  u.m.a., de manera que el término de la constante de acoplamiento  $g_{eff} \gg 1$  en la ecuación de GP (ver ecuación 4.26), siendo los términos dominantes el potencial de la trampa y el término no lineal de la ecuación de GP. Esto hace que la energía cinética no contribuya. Estos resultados se comparan con las ecuaciones (4.37), (4.44), (4.47) y (4.48) y se muestran en la figura 5.5.

**Segundo caso.**  $g_{eff} \approx 1$ . En este caso no se desprecia la parte de la energía cinética. En la grafica 5.6 comparamos nuestros resultados con el MDF y la SAA, para el caso del pozo cuadrado.

Procedamos a discutir los resultados de cada potencial.

### 5.7.1. Potencial cuadrado.

Conocemos la expresión para el estado base de GP en la aproximación de TF y de esta función de onda obtuvimos (ver capítulo 4.4.1) que el número de partículas atrapadas:  $(N - 1)R_0 = 2\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$ , donde  $\alpha = \frac{a_0}{4\pi a_s}$  (ver ecuación 4.37). En la literatura se conoce una solución analítica aproximada (SAA) [59], según la ecuación (4.41). Encontramos que para potenciales profundos ( $V_0 \gg 1$ ) nuestra solución con el MDF concuerda con la obtenida con TF. Para potenciales con profundidad menor que  $V_0 = -0.5$  u.o. la SAA se desprende de las soluciones con MDF y TF. En la gráfica 5.5, se comparan las tres soluciones. La línea azul es la solución

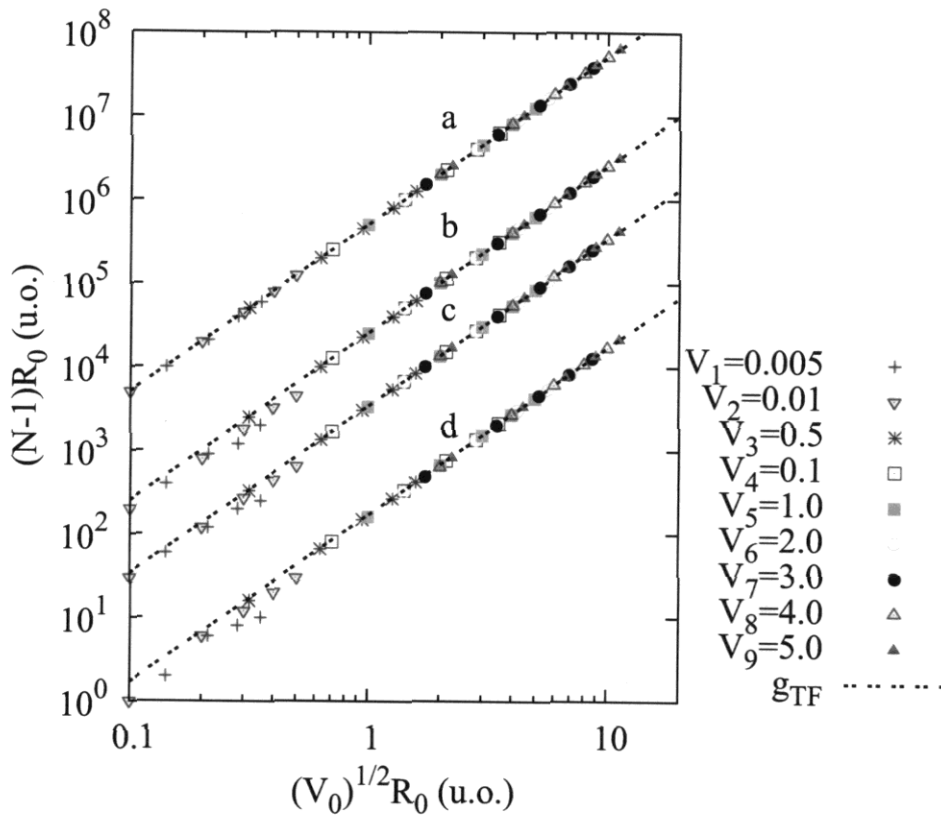


Figura 5.5: Número de partículas atrapadas con el MDF usando la aproximación de TF. Los símbolos son los obtenidos usando MDF, y la línea semicontinua es la aproximación de TF. (a) Corresponde para el pozo cuadrado, escalado por un factor de 1000. (b) Corresponde al pozo triangular, escalado por un factor de 100. (c) Es el pozo armónico, escalado en un factor de 10. (d) Potencial doble armónico.

analítica aproximada de L.D. Carr, *et al.*, [69], la línea roja corresponde a la aproximación de TF y los símbolos el resultado del MDF. Notemos que el MDF y SAA no desprecian el término de la energía cinética, sin embargo, en este caso es muy pequeño, de manera que esperamos una tendencia similar del MDF con la obtenida con la SAA y TF.

Sin embargo en la figura 5.6 mostramos el caso en donde la constante de acoplamiento es pequeña, y por lo tanto no se desprecia el término de la energía cinética. Como se puede notar los resultados del MDF y los SAA son muy parecidos pero se alejan de TF. Esto corresponde al caso de acoplamiento débil contrario al caso anterior que se conoce como acoplamiento fuerte.

### 5.7.2. Potencial triangular.

Para el pozo triangular tenemos que el número máximo de partículas atrapadas en el estado base, obtenida de la función de onda en la aproximación de TF es  $(N-1)R_0 = \alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$

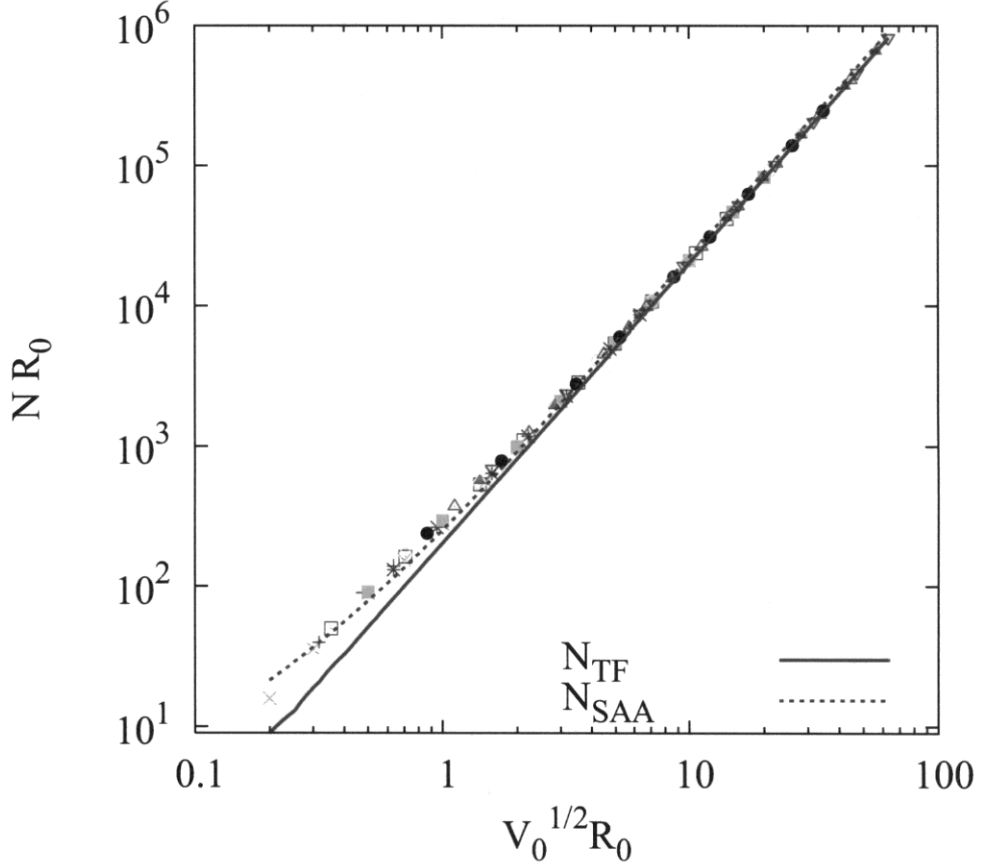


Figura 5.6: Número máximo de átomos,  $N_{max}$ , atrapados por el potencial cuadrado con varias longitudes  $R_0$  y profundidad  $V_0$  para un gas débilmente interactuando. La línea azul es la solución analítica aproximada (SAA) del pozo cuadrado [59], la línea roja corresponde a la solución aproximada de TF. Los puntos son los datos obtenidos con el MDF.

(ver ecuación (4.44)). Comparamos esta solución con el MDF, que se muestra en la parte (b) de la gráfica 5.5. Para potenciales  $V = -0.005$  u.o. y  $V_0 = -0.01$  u.o., los datos obtenidos por el MDF está por debajo que TF, esto se debe a que no se tiene buena precisión numérica.

### 5.7.3. Potencial armónico y doble armónico.

Para los potenciales armónico y doble armónico en el estado base se encontró en la aproximación de TF el número máximo de partículas es  $(N-1)R_0 = \frac{4}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$ , para el armónico; para el doble armónico encontramos que es  $(N-1)R_0 = \frac{2}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$  (vease ecuaciones (4.47) y (4.48)). Estos resultados se muestran en la parte (c) y (d), respectivamente de la gráfica 5.5. En los últimos tres potenciales no se conoce solución analítica reportada en la literatura con la cual poder comparar.

El potencial que atrapa más átomos es el pozo cuadrado con 12,712 átomos para un potencial

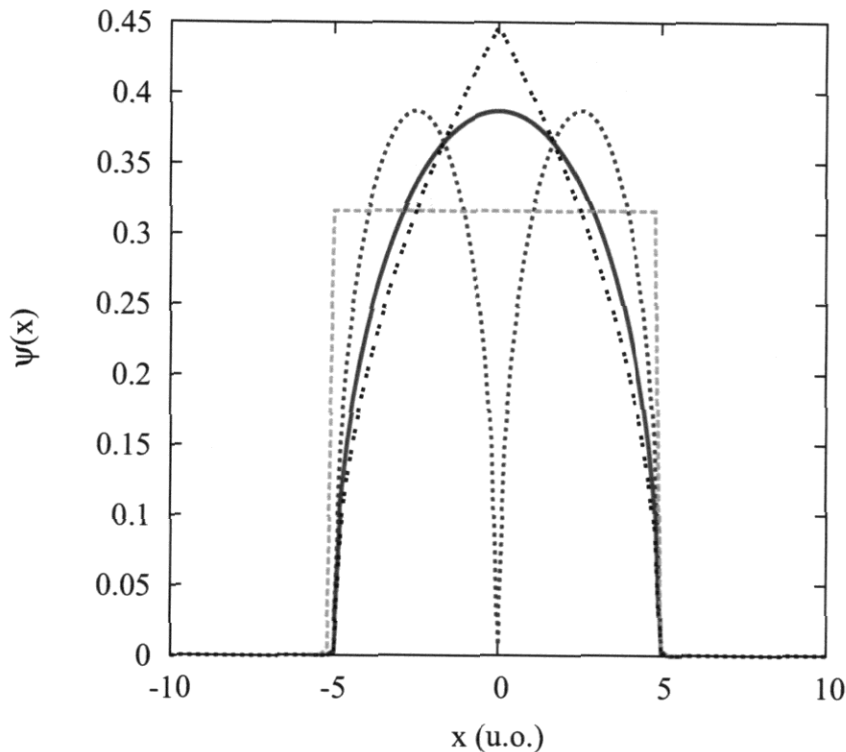


Figura 5.7: Función de onda para los cuatro potenciales, para el primer caso, con  $V_0 = -5.0$  u.o. y  $R_0 = 5.0$  u.o. La línea verde representa la función de onda para el pozo cuadrado. La línea negra es la función de onda para el pozo triangular. La línea azul corresponde al pozo doble armónico y la línea roja corresponde al potencial armónico.

de  $V = -5.0$  u.o. y ancho  $R_0 = 5$  u.o. El potencial triangular atrapa 6,356 átomos, el potencial armónico logra atrapar 8,471 átomos y el doble armónico con 4,231 átomos. Siendo el potencial doble armónico el que atrapa menos átomos.

En la figura 5.7 tenemos las funciones de onda, para el primer caso, para cada potencial para el caso particular de una profundidad del potencial de  $V_0 = -5.0$  u.o. y un ancho de  $R_0 = 5.0$  u.o. La función de onda para el pozo cuadrado es la línea verde y se asemeja a la forma que tiene el potencial. La línea negra es la función de onda para el pozo triangular; esta función de onda tiene la forma triangular del potencial, pero con la diferencia de que no sigue una línea recta, se curva hasta alcanzar un máximo en  $\Psi(x) = 0.45$  u.o. La línea azul corresponde al pozo doble armónico, donde la función de onda se divide en dos partes en  $x = 0$ , esto se debe a la forma del potencial, donde  $x$  toma valores que van desde  $0 < x < 5.0$  u.o. y por simetría, también toma valores en  $-5.0 < x < 0$  u.o. La línea roja al potencial armónico, al igual que las otras funciones de onda, tiene la forma del potencial.

En la figura 5.8 tenemos las funciones de onda para el caso del pozo cuadrado y del potencial armónico para el segundo caso. Como podemos observar, ahora aparece un efecto de “tunelaje” en la región fuera del potencial debido a una constante de acoplamiento pequeña. Ahora la

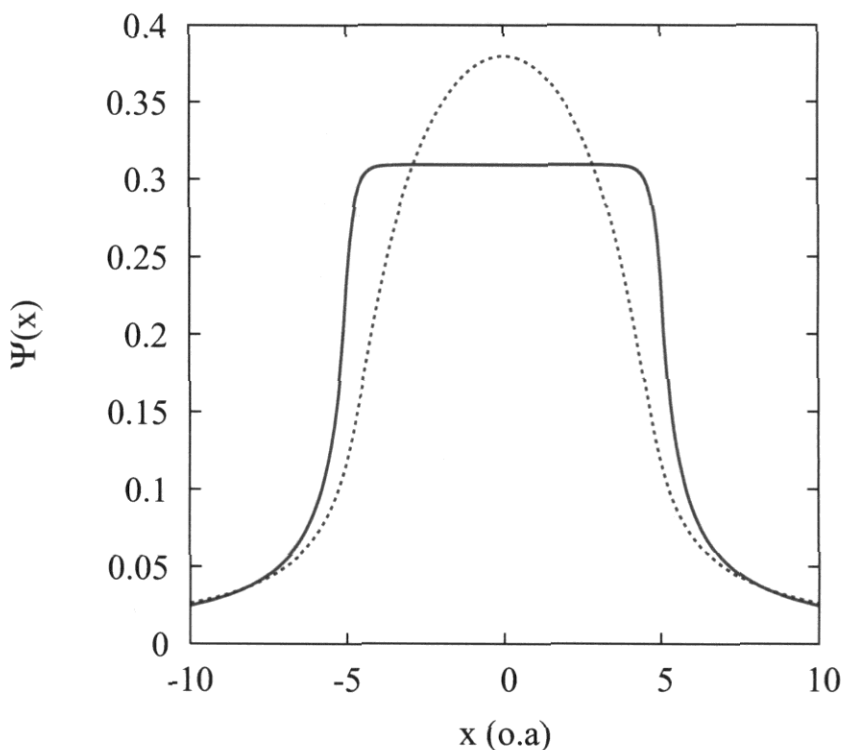


Figura 5.8: En esta figura vemos las funciones de onda para el caso de dos trampas o potenciales, el pozo cuadrado y el armónico, usando el MDF. La línea roja muestra la función de onda para el pozo cuadrado. La línea azul corresponde a la trampa armónica. Estos resultados corresponden al segundo caso.

línea roja corresponde al pozo cuadrado y vemos que a diferencia de la solución de TF, en el máximo de la función de onda tiene una forma suave y en los bordes de la trampa se presenta un efecto túnel.

En el caso de la trampa armónica vemos la diferencia entre la grafica 5.7 donde se muestra la función de onda, se encuentra en los bordes de la trampa, donde también se presenta un efecto túnel fuera del potencial de atrapamiento. Esto se debe a la contribución de la energía cinética de la ecuación de GP, cuyo término no se desprecia para resolver dicha ecuación con el MDF. En cambio, en la aproximación de TF, la función de onda para cada trampa toma la misma forma que los potenciales, y en donde los bordes de la trampa la función de onda decae a cero. Como se puede concluir, CBE's con acoplamiento débil tenderán a escaparse de la trampa a diferencia de gases con acoplamiento fuerte (aproximación de TF).

El número de átomos atrapados para cada potencial se puede deducir de la ecuación (4.31) de la aproximación de TF. Cada uno de estos potenciales tienen la misma estructura, es decir:  $(N - 1)R_0 \propto \alpha A(\sqrt{V_0}R_0)^2$ , donde  $A$  es un factor característico para cada trampa, por ejemplo  $A_c = 2$  para el pozo cuadrado,  $A_t = 1$  para el triangular,  $A_a = 4/3$  para el armónico y  $A_{da} = 2/3$  para el doble armónico. Siendo obviamente, el de mayor proporción el pozo cuadrado y el de

menor el doble armónico,  $A_c > A_t > A_c > A_{da}$ . Por lo que existe una ley de escalamiento, en donde el número de átomos atrapados en una trampa depende de la profundidad  $V_0$ , de la anchura  $R_0$ , y de la forma del potencial. Esto se obtiene a partir de la ecuación (4.28), donde despejamos la función de onda y haciendo  $\varepsilon = 0$ , para obtener el máximo número de átomos que soporta, integramos para cada región de cada potencial y obtenemos una expresión donde la  $g_{eff}$  se puede escribir de manera general

$$g_{eff} = - \int_D V(x) dx, \quad (5.53)$$

siendo  $D$  el dominio de integración y  $V(x)$  el potencial de la trampa de la guía. Este resultado es para una dimensión y se puede generalizar a tres dimensiones.

Lo que expresa la ecuación (5.53) es muy sencillo, si conocemos el potencial de atrapamiento  $V(x)$ , podemos determinar de manera aproximada el número de átomos atrapados en él. Esta ley de escalamiento es muy importante para encontrar los átomos que se pueden perder o atrapar en una guía de onda de un chip atómico.





# Capítulo 6

## Conclusiones.

El propósito de este trabajo ha sido dar a conocer los conceptos básicos y teóricos que componen una guía de onda de materia (CBE) en un *chip atómico*, así como la propagación y atrapamiento de una onda de materia. Iniciamos con el primer capítulo con una reseña histórica de cómo se obtuvieron experimentalmente los primeros CBE en el año de 1995. Describimos también, de manera cualitativa, el proceso con que se obtienen temperaturas muy bajas, a escala de  $10^{-9}$  Kelvin, en los laboratorios para poder enfriar a los átomos. Esto se da mediante el enfriamiento láser, pasando por trampas magento-ópticas para contener y seguir enfriando a los átomos ultra-fríos. En el segundo capítulo hicimos el análisis matemático donde encontramos las condiciones para obtener un CBE. Esto es, que al bajar la temperatura cercana al cero absoluto, obtenemos una temperatura crítica,  $T_c$ , haciendo que un gran número de partículas ocupen el estado base para  $T < T_c$ . Esto hace que la longitud de onda de de Broglie,  $\lambda_{db}$ , de cada partícula se incrementa y estos se traslapan, dando a lugar una macro-función de onda de materia.

Una vez conociendo el desarrollo teórico del CBE y sus condiciones en que ocurre este fenómeno, vimos en el capítulo tres el mecanismo y aparatos con los cuales se pueden manipular los CBE. Las guías de onda mediante diferentes configuraciones de alambres que conducen corrientes resultaron ser muy importantes para poder atrapar y guiar a los átomos ultra fríos en un chip atómico. La estructura del chip atómico se construye mediante combinaciones de varias guías de onda sobre la superficie de un circuito, que en vez de conducir corriente eléctrica conduce ondas de materia (CBE) sobre las guías de onda formadas por la combinación de campos magnéticos y alambres conductores de corrientes. Esta habilidad de manipular ondas de materia con chips atómicos ha permitido tener aplicaciones; como por ejemplo, la interferometría de átomos. Tal es el caso de un chip atómico en guías de materia en forma de Y o X, que se utilizan para estos fines.

Para describir a los  $N$  átomos que forman el CBE, vimos en el capítulo cuatro que mediante la aproximación de campo promedio, la ecuación que describe al CBE se llama ecuación de Gross-Pitaevskii (GP), que tiene la forma de la ecuación de Schrödinger más un término no-lineal de interacción cuya constante de acoplamiento es proporcional a la longitud de dispersión,  $a_s$ , de una onda- $s$  de dos bosones interaccionando cuando  $k \rightarrow 0$ , es decir átomos fríos. El estado base se puede calcular con la aproximación de Thomas-Fermi (TF), que des-

precia la energía cinética de la ecuación de GP, y estudiamos el caso de cuatro potenciales de atrapamiento (trampas en guías de onda), propusimos el pozo cuadrado, triangular, armónico y doble armónico. Y encontramos que el número de partículas atrapadas en esos potenciales cuando  $\varepsilon = 0$ , son  $(N - 1)R_0 = 2\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$  para el pozo cuadrado,  $(N - 1)R_0 = \alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$  para el pozo triangular,  $(N - 1)R_0 = \frac{4}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$  para el pozo armónico y  $(N - 1)R_0 = \frac{2}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2$  en el caso del pozo doble armónico. Donde  $\alpha = a_0/a_s4\pi$ .

De manera que en la aproximación de TF, para  $\varepsilon = 0$ , se puede relacionar la constante de acoplamiento  $g_{eff}$  y el número de partículas que se encuentran en el potencial con una ley de escalamiento que depende de la profundidad y de la anchura del potencial mediante

$$g_{eff}^{TF} = - \int_D V(x)dx,$$

lo cual nos da una expresión analítica aproximada.

Esta ley de escalamiento es muy importante por que expresa de manera sencilla el número de átomos de un CBE y que pueden quedar atrapados en una trampa de la guía de onda de un chip atómico. También quisieramos puntualizar que esta ley de escalamiento no se encuentra reportada en la literatura y es una contribución novedosa de este trabajo. En este momento se encuentra en proceso el artículo en que se reporta este trabajo. Obviamente, la manera correcta de obtener el número de átomos ligados en el potencial, es incluir el término de energía cinética el cual requiere una solución numérica de la ecuación de GP.

En el capítulo cinco implementamos el MDF para resolver de forma numérica la ecuación GP. La ventaja de usar el método de diferencias finitas, en primera instancia es que su implementación es fácil, convirtiendo a un problema con derivadas parciales de primer y segundo orden como la ecuación de GP, a un problema de álgebra lineal. De esta forma obtenemos una matriz tridiagonal y solamente se requiere el método de diagonalización LU para encontrar sus eigenvalores, que corresponde al tamaño de la red  $N$ , que nosotros determinamos. Luego se utilizó el MCN y el tiempo imaginario para determinar el máximo número de átomos atrapados. Los resultados que obtuvimos son para dos casos, el primero corresponde a la solución cuando  $g_{eff} \gg 1$ . Se compararon los datos numéricos en la aproximación de TF, encontrándose que el la guía de onda que atrapa más partículas es el pozo cuadrado con 12,712 átomos, le sigue el pozo armónico con 8,471 átomos, el pozo doble triangular puede atrapar 6,356 partículas y el que atrapa menos es el potencial doble armónico con 4,231 átomos. Estos resultados fueron calculados con una profundidad del potencial de  $V_0 = -5.0$  u.o., y un ancho de  $R_0 = 5.0$  u.o. Nuestros resultados se ajustan a la aproximación de TF para grandes números de átomos, cuando el tamaño del potencial es de  $V_0 = -0.5$  u.o. (gas con acoplamiento fuerte).

En el segundo caso, resolvimos  $g_{eff} \approx 1$  en la ecuación de GP. Encontrando que nuestros datos numéricos se ajustan al caso de la solución analítica aproximada de L.D. Carr, para el caso de pozo cuadrado. Con esto demostramos que implementando el método de diferencias finitas en la ecuación de Gross-Pitaevskii, se obtienen muy buenas soluciones.

Como perspectiva en base de este trabajo para un futuro, es mejorar la solución analítica aproximada para el caso del pozo cuadrado, y proponer soluciones analíticas para los otros tres potenciales. En la parte numérica sería extender el caso de una dimensión a tres dimensiones y estudiar otras propiedades físicas como la presencia de vorticidad en el CBE o tunelaje en los

potenciales de atrapamiento. También requerimos mejorar nuestro código para potenciales de atrapamiento poco profundos, usando otros métodos como el del *tiempo espectral*, *Runge-Kutta* o *cubic spline*.

Este trabajo se presentó en la sesión de poster PA1-3 del “*XXIX International Conference on Phenomena in Ionized Gases*” que se llevó a cabo en la ciudad de Cancún, México en julio del 2009.

Finalmente queremos mencionar que este trabajo tiene una gran relevancia en la investigación de chips atómicos siendo un campo relativamente nuevo a nivel mundial ubicándose como un tema de investigación de frontera en la física. Basta recalcar que no existen antecedentes de trabajos previos en este campo en el país.



# Apéndice A

## Programa en Fortran 90 para resolver la evolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Código para Fortran 90 usando el método de diferencias finitas para resolver la evolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

```
!!Este programa calcula la transmisión
!!y reflexión de una partícula que pasa por un
!!pozo de potencial cuadrado constante.
!*****
PROGRAM TR
!
IMPLICIT NONE
INTEGER it,tSkip,tsk,npt                !Tiempo de iteracion
INTEGER wrtindex, InitFlag
INTEGER xNumPoints, xp,tp,ix           ! numero de puntos para x y t
CHARACTER*64 InitFile
DOUBLE PRECISION xMin,xMax,dx,x        ! x frontera celda y delta x
DOUBLE PRECISION tmin,tmax,dt,t        ! t frontera celda y delta t
DOUBLE PRECISION Mass,Vo
DOUBLE PRECISION Ve,g0,ke,Pi,R0,width,vel,norma,norma1,norma2,norma3, &
                                                normaR,normaT

DOUBLE PRECISION KineticE,Norm,PotentialV
DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE::V(:)
DOUBLE COMPLEX, ALLOCATABLE::Psi(:),xDL(:),xD(:),xDU(:),xDu2(:)
INTEGER,ALLOCATABLE::xIPIV(:)

!
! Reads initial time, final time, steps to skip, delta t.
read(5,*)
read(5,*) tmin, tmax, tSkip, dt
print *, tmin, tmax, tSkip, dt
read(5,*)
! reads space grid as xMin,xMax,and number of points
read(5,*) xMin,xMax,xNumPoints
print *, xMin,xMax,xNumPoints
read(5,*)
! for the sch. with a square potential reads
! mass, potential height/deep V0, center position R0,
! initial gaussian wavepacket center g0, width and velocity.
```

80APÉNDICE A. TRANSMISIÓN Y REFLEXIÓN DE UNA PARTÍCULA: CÓDIGO EN F90.

```

read(5,*) Mass,Vo,R0,g0,Width,Vel
read(5,*)
!
! in case of providing with a file with an initial wavefunction
! 0 is no, 1 is yes
read(5,*) InitFlag
read(5,'(A)') InitFile
Pi = 3.14159265358979323846d0
xp = xNumPoints+1
dx = (xmax-xmin)/xNumPoints
npt = (tmax-tmin)/dt+1
ALLOCATE(Psi(xp),xDL(xp),xD(xp),xDU(xp),xDU2(xp), &
          xIPIV(xp),V(xp))
!
! *****
! Initialize the wavefunction to a gaussian wavepacket
! *****
IF (InitFlag .eq.1) THEN
  open (unit=7,file=InitFile)
  DO it=1, xp
    READ(7,*) x,Psi(it)
  ENDDO
  close(7)
ELSE
  CALL Psils (xp,xmin,dx,Psi,g0,width,vel)
  CALL NormPsi (xp,dx,Psi)
ENDIF
!
! *****
! GET THE LU DECOMPOSITION FOR THE X COMPONENT OF THE BIG MATRIX
! (1-V d**2)
! *****
CALL LUdecomp (xp,Dx,Dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,mass)
! *****
! loop in time starts here
! *****
tsk=0
wrtindex=100
DO it=0, npt
  t=tmin+it*dt
! *****
! error in grid to include normallization
! *****
  norma1 = Norma(xp,dx,Psi)
! *****
! error in grid to include normallization TRANSMISSION
! *****
  norma2 = NormaT(R0,xmin,xp,dx,Psi)
! *****
! ERROR IN GRID TO INCLUDE NORMALLIZATION REFLECTION
! *****
  norma3 = NormaR (R0,xmin,xp,dx,Psi)
! *****
! now, let's calculate the kinetic energy of this wavefunction
! *****
  ke=KineticE(xp,dx,Psi,mass)
! *****
! now, let's calculate the potential energy of this wavefunction
! *****
  Ve=PotentialV(xp,xmin,dx,Psi,R0,V,Vo)
! *****
! here we calculate exp(i(t-t0)V/2) Psi(x,t) and return
! it in the same array Psi
! *****
  CALL ExpVPsi(xp,Dt,Psi,V)
! *****
! HERE WE APPLY (1-I Dt t) Psi(x,t) and return
! it in the same array Psi vi crank-Nicholson method
! *****
  CALL xCnimplicit (xp,dx,dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,Psi,mass)
! *****
! here we calculate exp((t-t0)V/2) Psi(x,y,z,t) and return
! it in th same array Psi
! *****
  CALL ExpVPsi (xp,Dt,Psi,V)
! *****
! if within the time step to write do so

```

```

! *****
      IF (it-tsk .EQ.0) then
        write(6,'(F10.5,F10.7,3F15.7,2F10.7)') t,normal,ke,ve,ke+ve,norma2,norma3
        tsk=tsk+tSkip
        wrtindex=wrtindex+1
        open (unit=wrtindex)
        DO ix=1,xp
          x=xmin+(ix-1)*dx
          WRITE(wrtindex,'(2F12.5,2F12.6)') t,x, REAL(Psi(ix)), &
            AIMAG(Psi(ix))
        ENDDO
        CALL FLUSH(wrtindex)
      CLOSE(wrtindex)
    ENDDO
  ENDDO
DEALLOCATE (Psi)
STOP
END
!
! *****
! pSILS FUNCTION INITIALIZATION TO ARRAY PSI GAUSSIAN WAVEPACKET
! *****
SUBROUTINE Psils(nx, xm, dx, Psi, R0, w, vel)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER j, nx
  DOUBLE PRECISION xm, dx, x, R0, w, vel
  DOUBLE COMPLEX Psi(nx), I

  I=(0.d0, 1.0d0)

  DO j=1, nx
    x=xm+(j-1)*dx
    Psi(j)=EXP(-(x-R0)/w)**2+I*vel*x)
  ENDDO
  RETURN
END
! *****
! CALCULATES THE NORM AND RENORMALIZES AN ARRAY g BY USING THE
! GRID FUNCTION BASED ON THE TRAPEZOIDAL SCHEME
! *****
SUBROUTINE NormPsi(nx, dx, Psi)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER i, nx
  DOUBLE PRECISION dx, IntTrapz, norm1
  DOUBLE PRECISION f(nx)
  DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

  DO i=1, nx
    f(i)=ABS(Psi(i))**2
  ENDDO

  Norm1=IntTrapz(nx, dx, f)
  Norm1=1.0d0/DSQRT(Norm1)

  Psi=Norm1*Psi
  RETURN
END
! *****
! this subroutine calculates the LU decomposition for the Crank-Nicholson
! model of the implicit time propagation method.
! *****
SUBROUTINE LUdecomp(n, dx, dt, DL, D, DU, DU2, IPIV, m)
  IMPLICIT NONE

  INTEGER n
  INTEGER ii, INFO
  INTEGER IPIV(n)
  DOUBLE PRECISION dx, dt, m
  DOUBLE COMPLEX I, nu, DL(n), D(n), DU(n), DU2(n)

  I=(0.0d0, 1.0d0)
  nu=-I*dt/(4.0d0*m*dx**2)
  DO ii=1, n
    DL(ii)=nu

```

82 APÉNDICE A. TRANSMISIÓN Y REFLEXIÓN DE UNA PARTÍCULA: CÓDIGO EN F90.

```

                D(ii)=1.0d0-2.0d0*nu
                DU(ii)=nu
            ENDDO
! *****
! ZGTTRF-COMPUTE AN LU factorization of a complex triangular matrix A
! using elimination with partial pivoting and row interchanges
! *****
            CALL ZGTTRF(n,DL,D,DU,DU2,IPIV,INFO)
            IF (INFO .NE.0) THEN
                WRITE(6,*) "ERROR EN ZGTTRF DIAGONALIZACION (LU)"
                STOP
            ENDIF
            RETURN
        END
! *****
! CALCULATES THE NORM i.e. <g|g> of an array g by using the integrate
! function based on the trapexoidal scheme
! *****
        DOUBLE PRECISION FUNCTION Norma(nx,dx,Psi)
        IMPLICIT NONE
        INTEGER i,nx
        DOUBLE PRECISION dx,IntTrapz
        DOUBLE PRECISION f(nx)
        DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

        DO i=1,nx
            f(i)=REAL (Psi(i)*CONJG(Psi(i)))
        ENDDO
        Norma=IntTrapz(nx,dx,f)
        RETURN
    END
! *****
! CALCULATES THE NORM i.e. <g|g> of an array g by using the integrate
! function based on the trapexoidal scheme. TRANSMISSION.
! *****
        DOUBLE PRECISION FUNCTION NormaT(Ro,xm,nx,dx,Psi)
        IMPLICIT NONE
        INTEGER i,j,nx,iRo
        DOUBLE PRECISION dx,IntTrapz,Ro,xm,x
        DOUBLE PRECISION f(nx)
        DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

        x=xm
        iRo=1
        DO WHILE(x.LT.Ro)
            iRo=iRo+1
            x=x+dx
        ENDDO

        DO I=1,NX
            f(i)=0.0D0
        ENDDO

        DO j=iRo, nx
            f(j)=REAL (Psi(j)*CONJG(Psi(j)))
        ENDDO
        NormaT=IntTrapz(nx,dx,f)

        RETURN
    END
! *****
! CALCULATES THE NORM i.e. <g|g> of an array g by using the integrate
! function based on the trapexoidal scheme. REFLECTION.
! *****
        DOUBLE PRECISION FUNCTION NormaR(Ro,xm,nx,dx,Psi)
        IMPLICIT NONE
        INTEGER i,j,nx,iRo
        DOUBLE PRECISION dx,IntTrapz,Ro,xm,x
        DOUBLE PRECISION f(nx)
        DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

        x=xm
        iRo=1
        DO WHILE(x.LT.-Ro)

```



```

        iRo=iRo+1
        x=x+dx
    ENDDO

DO I=1,NX
    f(i)=0.0D0
ENDDO

DO j=1,iRo
    f(j)=REAL (Psi(j)*CONJG(Psi(j)))
ENDDO
NormaR=IntTrapz(nx,dx,f)

RETURN
END
!
! *****
! CALCULATES THE KINETIC ENERGY  $0.5 \cdot \langle f | -\text{NABLA}^2 | f \rangle$  FOR THE 1D ARRAY f
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION KineticE(nx,dx,ff,m)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,dx2,IntTrapz,m
DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE ::tmp(:)
DOUBLE COMPLEX D2rx,ff(nx)
ALLOCATE(tmp(nx))
dx2=dx*dx
DO i=1,nx
    IF(i==1)THEN
        D2rx=(-2.0d0*ff(i)+ff(i+1))/dx2
    ELSE IF (i==nx) THEN
        D2rx=(ff(i-1)-2.0d0*ff(i))/dx2
    ELSE
        D2rx=(ff(i-1)-2.0d0*ff(i)+ff(i+1))/dx2
    ENDIF
    tmp(i)=REAL(ff(i)*CONJG(D2rx))
ENDDO
KineticE=-0.5d0*IntTrapz(nx,dx,tmp)/m
RETURN
END
!
! *****
! CALCULATE THE AVERAGED POTENTIAL ENERGY  $\langle f | V | f \rangle$  using the trapezoidal
! integration integral
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION PotentialV(nx,xm,dx,func,Ro,V,Vo)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION xm,dx,x,Vpot,IntTrapz,Ro,Vo,V(nx)
DOUBLE PRECISION xt(nx)
DOUBLE COMPLEX func(nx)
DO i=1,nx
    x=xm+(i-1)*dx
    V(i)=Vpot(x,Ro,Vo)
    xt(i)=REAL(func(i)*CONJG(func(i))*V(i))
ENDDO
PotentialV=IntTrapz(nx,dx,xt)
RETURN
END
!
! *****
SUBROUTINE ExpVPsi(nx,dt,Psi,V)
IMPLICIT NONE

INTEGER k,nx
DOUBLE PRECISION dt,V(nx)
DOUBLE COMPLEX I,Psi(nx)
I=(0.0d0,1.0d0)
DO k=1,nx
    Psi(k)=EXP(-I*dt*V(k)/2.0d0)*Psi(k)
ENDDO
RETURN
END
!
! *****
! solves the  $(1-\text{nu} \cdot dx^2) f$  matrix by invoking the ZGTTRS subroutine
! in the crank-nicholuson scheme
! *****

```

84 APÉNDICE A. TRANSMISIÓN Y REFLEXIÓN DE UNA PARTÍCULA: CÓDIGO EN F90.

```

SUBROUTINE xCNimplicit(nx,dx,dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,Psi,m)
IMPLICIT NONE
INTEGER nx,ii,INFO,xIPIV(nx)
DOUBLE PRECISION dx,dt,m
DOUBLE COMPLEX nu,I,xDL(nx),xD(nx),xDU(nx),xDU2(nx),Psi(nx)
DOUBLE COMPLEX NewPsi(nx)
I=(0.0d0,1.0d0)
nu=-I*dt/(4.0d0*m*dx**2)
NewPsi(1)=(1.0d0+nu)*Psi(1)-nu*Psi(2)
DO ii=2,nx-1
    NewPsi(ii)=(1.0d0+2.0d0*nu)*Psi(ii)-nu*(Psi(ii-1)+Psi(ii+1))
ENDDO
NewPsi(nx)=(1.0d0+2.0d0*nu)*Psi(nx)-nu*Psi(nx-1)
*****
!
!
!
ZGTTTRS-solve the systems of equations A*X=B
*****
CALL ZGTTTRS('N',nx,1,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,NewPsi,nx,INFO)
IF (INFO.NE.0) THEN
    WRITE(6,*)"xCNimplicit failed in solve ZGTTTRS"
    stop
ENDIF
DO ii=1,nx
    Psi(ii)=NewPsi(ii)
ENDDO
RETURN
END
*****
!
!
!
INTEGRATION BY USING THE TRAPEZOIDAL METHOD
*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION IntTrapz(nx,dx,f)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,f(nx),tmp
tmp=0.0d0
DO i=2,nx-1
    tmp=tmp+f(i)
ENDDO
IntTrapz=(tmp+0.5d0*(f(1)+f(nx)))*dx
RETURN
END
*****
!
!
!
POTENTIAL FOR INTERACTION. IN THIS CASE IT IS A CONSTANT POTENTIAL
*****
DOUBLE PRECISION FUNCTION Vpot(x,Ro,Vo)
IMPLICIT NONE
DOUBLE PRECISION x,Ro,Vo
IF (ABS(x).GT.Ro) THEN
    Vpot=0.0d0
ELSE IF (ABS(x).LT.Ro) THEN
    Vpot=Vo
ENDIF
RETURN
END

```

## Apéndice B

# Programa en Fortran 90 para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii.

Código para Fortran 90 usando el método de diferencias finitas para resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii.

```
!!SOLUCIÓN A LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII
!!
!!*****
PROGRAM GP
!
  IMPLICIT NONE
  INTEGER it,tSkip,tsk,npt           !Tiempo de iteraccion
  INTEGER wrtindex, InitFlag
  INTEGER xp,tp,ix,xNumPoints       ! numero de puntos para x y t
  CHARACTER*64 InitFile
  DOUBLE PRECISION xMin,xMax,dx,x, tmp      ! x frontera celda y delta x
  DOUBLE PRECISION tmin,tmax,dt,t, xrf, xif      ! t frontera celda y del
  DOUBLE PRECISION N, Mass,Vo,geff,a, derror,ef,ea,erx
  DOUBLE PRECISION Ve,g0,ke,Pi,R0,width,vel,norma,normal
  DOUBLE PRECISION KineticE,Norm,PotentialV
  DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE::V(:)
  DOUBLE COMPLEX I
  DOUBLE COMPLEX, ALLOCATABLE::Psi(:),xDL(:),xD(:),xDU(:),xDu2(:)
  INTEGER,ALLOCATABLE::xIPIV(:)
!
  I=(0.0d0,1.0d0)
! Reads initial time, final time, steps to skip, delta t.
  read(5,*)
  read(5,*) tmin, tmax, tSkip, dt, erx
! print *, tmin, tmax, tSkip, dt, erx
  read(5,*)
! reads space grid as xMin,xMax,and number of points
  read(5,*) xMin,xMax,dx
! print *, xMin,xMax,dx
  read(5,*)
! for the sch. with a square potential reads
! mass, potential height/deep V0, center position R0,
! initial gaussian wavepacket center g0, width and velocity.
!
```

86APÉNDICE B. EVOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII: CÓDIGO EN F90.

```

read(5,*) Mass,Vo,a,a0,N,R0,g0,Width,Vel
! print *, Mass,Vo,a,a0,N,R0,g0,Width,Vel
read(5,*)
! in case of providing with a file with an initial wavefunction
! 0 is no, 1 is yes
read(5,*) InitFlag
! print *, InitFlag
read(5,*)
! Lee el archivo de inicializacion
read(5,'(A)') InitFile
! print *, InitFile
Pi = 3.14159265358979323846d0
geff=(4.0d0*Pi*a*(N-1.0d0))/(Mass*a0)
xNumPoints = (xmax-xmin)/dx
xp = xNumPoints+2
npt = (tmax-tmin)/dt+1
! print *, xNumPoints, xp, dx
ALLOCATE(Psi(xp),xDL(xp),xD(xp),xDU(xp),xDU2(xp), &
! xIPIV(xp),V(xp))
! *****
! Initialize the wavefunction to a gaussian wavepacket
! *****
IF (InitFlag .eq.1) THEN
! print *, InitFile
open (unit=17,file=InitFile)
DO it=1, xp
! READ(17,*) tmp, x, xrf, xif
! print *, it, tmp, x, xrf, xif
! Psi(it)=xrf+I*xif
!
! ENDDO
! close(17)
ELSE
! CALL Psils (xp,xmin,dx,Psi,R0,Vo)
! CALL NormPsi (xp,dx,Psi)
ENDIF
! *****
! GET THE LU DECOMPOSITION FOR THE X COMPONENT OF THE BIG MATRIX
! (1-V d**2)
! *****
! CALL LUdecomp (xp,Dx,Dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,mass)
! *****
! loop in time starts here
! *****
! tsk=tSkip
! wrtindex=100
! ea=1.0d0
! it=0
! derror=1.0d0
! DO WHILE (dabs(derror).gt.ern )
! it=it+1
! t=tmin+it*dt
! *****
! error in grid to include normalization
! *****
! CALL NormPsi (xp,dx,Psi)
!
! normal = Norma(xp,dx,Psi)
! *****
! now, let's calculate the kinetic energy of this wavefunction
! *****
! ke=KineticE(xp,dx,Psi,mass)
! *****
! now, let's calculate the potential energy of this wavefunction
! *****
! Ve=PotentialV(xp,xmin,dx,Psi,R0,V,Vo,geff)
! *****
! here we calculate exp(i(t-t0)V/2) Psi(x,t) and return
! it in the same array Psi
! *****
! CALL ExpVPsi(xp,Dt,Psi,V)

```

```

! *****
! HERE WE APPLY (1-I Dt t) Psi(x,t) and return
! it in the same array Psi vi crank-Nicholson method
! *****
! CALL xCnimplicit (xp,dx,dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,Psi,mass)
! *****
! here we calculate exp((t-t0)V/2) Psi(x,y,z,t) and return
! it in th same array Psi
! *****
! CALL ExpVPsi (xp,Dt,Psi,V)
! *****
! if whithin the time step to write do so
! *****
!     ef=ke+Ve
!     derror=(ef-ea)/ef
!     ea=ef
!
!     IF (it-tsk .EQ.0) then
!
!         write(6,'(F10.5,F10.7,3F15.7,E14.6)') t,normal,ke,Ve,ef,derror
!         tsk=tsk+tSkip
!         call flush(6)
!
!     ENDIF
!
!     IF (it.gt.1000000 ) THEN
!         print *, "Exedi 100000 iteraciones"
!         write(6,'(F10.5,F10.7,3F15.7,E14.6)') t,normal,ke,Ve,ef,derror
!         open (unit=wrtindex)
!         DO ix=1,xp
!             x=xmin+(ix-1)*dx
!             WRITE(wrtindex,*) t,x, REAL(Psi(ix)), &
!                                     AIMAG(Psi(ix))
!         ENDDO
!         CALL FLUSH(wrtindex)
!         close(wrtindex)
!         stop
!     endif
! ENDDO
!
! write(6,'(F10.5,F10.7,3F15.7,E14.6)') t,normal,ke,Ve,ef,derror
! open (unit=wrtindex)
! DO ix=1,xp
!     x=xmin+(ix-1)*dx
!     WRITE(wrtindex,*) t,x, REAL(Psi(ix)),AIMAG(Psi(ix))
! ENDDO
! CALL FLUSH(wrtindex)
! close(wrtindex)
! DEALLOCATE (Psi)
! STOP
! END
! *****
! pSILS FUNCTION INITIALIZATION TO ARRAY PSI GAUSSIAN WAVEPACKET
! *****
! SUBROUTINE Psils(nx,xm,dx,Psi,R0,V0)
! IMPLICIT NONE
! INTEGER j,nx
! DOUBLE PRECISION xm,dx,x,R0,V0
! DOUBLE COMPLEX Psi(nx),I
!
! I=(0.d0,1.0d0)
!
! DO j=1,nx
!     x=xm+(j-1)*dx
!     IF (ABS(x).GT.R0) THEN
!         Psi(j)=0.0d0
!     ELSE IF (ABS(x).LT.R0) THEN
!         Psi(j)=sqrt(-V0)
!     ENDIF
!     print *, x,Psi(j)
! ENDDO
! RETURN
! END
! *****

```

88APÉNDICE B. EVOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII: CÓDIGO EN F90.

```

!      CALCULATES THE NORM AND RENORMALIZES AN ARRAY g BY USING THE
!      GRID FUNCTION BASED ON THE TRAPEZOIDAL SCHEME
!      *****
SUBROUTINE NormPsi(nx,dx,Psi)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,IntTrapz,norm1
DOUBLE PRECISION f(nx)
DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

!
DO i=1,nx
    f(i)=ABS(Psi(i))**2
ENDDO

!
Norm1=IntTrapz(nx,dx,f)
Norm1=1.0d0/DSQRT(Norm1)

!
Psi=Norm1*Psi
RETURN
END
!
! *****
! this soubrutine calculates the LU decomposition for the Crank-Nicholson
! model of the implicit time propagation method.
! *****
SUBROUTINE LUdecomp(n,dx,dt,DL,D,DU,DU2,IPIV,m)
IMPLICIT NONE

INTEGER n
INTEGER ii,INFO
INTEGER IPIV(n)
DOUBLE PRECISION dx,dt,m,nu
DOUBLE COMPLEX DL(n),D(n),DU(n),DU2(n)

!
nu=-dt/(4.0d0*m*dx**2)
DO ii=1,n
    DL(ii)=nu
    D(ii)=1.0d0-2.0d0*nu
    DU(ii)=nu
ENDDO

!
! *****
! ZGTTRF-COMPUTE AN LU factorization of a complex triangular matrix A
! using elimination with partial pivoting and row interchanges
! *****
CALL ZGTTRF(n,DL,D,DU,DU2,IPIV,INFO)
IF (INFO .NE.0) THEN
    WRITE(6,*) "ERROR EN ZGTTRF DIAGONALIZACION (LU)"
    STOP
ENDIF
RETURN
END
!
! *****
! CALCULATES THE NORM i.e. <g|g> of an array g by using the integrate
! function based on the trapexoidal scheme
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION Norma(nx,dx,Psi)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,IntTrapz
DOUBLE PRECISION f(nx)
DOUBLE COMPLEX Psi(nx)

DO i=1,nx
    f(i)=REAL (Psi(i)*CONJG(Psi(i)))
ENDDO
Norma=IntTrapz(nx,dx,f)
RETURN
END
!
! *****
! CALCULATES THE KINETIC ENERGY  $0.5 \cdot \langle f | -\nabla^2 | f \rangle$  FOR THE 1D ARRAY f
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION KineticE(nx,dx,ff,m)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,dx2,IntTrapz,m

```

```

DOUBLE PRECISION, ALLOCATABLE ::tmp(:)
DOUBLE COMPLEX D2rx,ff(nx)
ALLOCATE(tmp(nx))
dx2=dx*dx
DO i=1,nx
  if(i==1)THEN
    D2rx=(-2.0d0*ff(i)+ff(i+1))/dx2
  ELSE IF (i==nx) THEN
    D2rx=(ff(i-1)-2.0d0*ff(i))/dx2
  ELSE
    D2rx=(ff(i-1)-2.0d0*ff(i)+ff(i+1))/dx2
  ENDF
  tmp(i)=REAL(ff(i)*CONJG(D2rx))
ENDDO
KineticE=-0.5d0*IntTrapz(nx,dx,tmp)/m
RETURN
END
! *****
! CALCULATE THE AVERAGED POTENTIAL ENERGY <f|V|f> using the trapezoidal
! integration integral
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION PotentialV(nx,xm,dx,func,Ro,V,Vo,geff)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION xm,dx,x,Vpot,IntTrapz,Ro,Vo,V(nx),geff
DOUBLE PRECISION xt(nx)
DOUBLE COMPLEX func(nx)
!
DO i=1,nx
  x=xm+(i-1)*dx
  V(i)=Vpot(x,Ro,Vo)+REAL(func(i)*CONJG(func(i)))*geff
  xt(i)=REAL(func(i)*CONJG(func(i))*V(i))
ENDDO
PotentialV=IntTrapz(nx,dx,xt)
RETURN
END
! *****
SUBROUTINE ExpVPsi(nx,dt,Psi,V)
IMPLICIT NONE
!
INTEGER k,nx
DOUBLE PRECISION dt,V(nx)
DOUBLE COMPLEX I,Psi(nx)
I=(0.0d0,1.0d0)
DO k=1,nx
  print *, k, Psi(k)
  Psi(k)=EXP(-dt*V(k)/2.0d0)*Psi(k)
ENDDO
RETURN
END
! *****
! solves the (1-nu*dx**2)f matrix by invoking the ZGTRRS subroutine
! in the crank-nicholson scheme
! *****
SUBROUTINE xCNimplicit(nx,dx,dt,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,Psi,m)
IMPLICIT NONE
INTEGER nx,ii,INFO,xIPIV(nx)
DOUBLE PRECISION dx,dt,m,nu
DOUBLE COMPLEX xDL(nx),xD(nx),xDU(nx),xDU2(nx),Psi(nx)
DOUBLE COMPLEX NewPsi(nx)
!
nu=-dt/(4.0d0*m*dx**2)
NewPsi(1)=(1.0d0+2.0d0*nu)*Psi(1)-nu*Psi(2)
DO ii=2,nx-1
  NewPsi(ii)=(1.0d0+2.0d0*nu)*Psi(ii)-nu*(Psi(ii-1)+Psi(ii+1))
ENDDO
NewPsi(nx)=(1.0d0+2.0d0*nu)*Psi(nx)-nu*Psi(nx-1)
! *****
! ZGTRRS-solve the systems of equations A*X=B
! *****
CALL ZGTRRS('N',nx,1,xDL,xD,xDU,xDU2,xIPIV,NewPsi,nx,INFO)
IF (INFO.NE.0) THEN
  WRITE(6,*)"xCNimplicit failed in solve ZGTRRS"
  stop

```

90 APÉNDICE B. EVOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAIEVSKII: CÓDIGO EN F90.

```

ENDIF
DO ii=1,nx
    Psi(ii)=NewPsi(ii)
ENDDO
RETURN
END
!
! *****
! INTEGRATION BY USING THE TRAPEZOIDAL METHOD
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION IntTrapz(nx,dx,f)
IMPLICIT NONE
INTEGER i,nx
DOUBLE PRECISION dx,f(nx),tmp
tmp=0.0d0
DO i=2,nx-1
    tmp=tmp+f(i)
ENDDO
IntTrapz=(tmp+0.5d0*(f(1)+f(nx)))*dx
RETURN
END
!
! *****
! POTENTIAL FOR INTERACTION. iN THIS CASE IT IS A CONSTANT POTENTIAL
! *****
DOUBLE PRECISION FUNCTION Vpot(x,Ro,Vo)
IMPLICIT NONE
DOUBLE PRECISION x,Ro,Vo
IF (ABS(x).GT.Ro) THEN
    Vpot=0.0d0
!
! POTENTIAL SQUARE
!
ELSE IF (ABS(x).LT.Ro) THEN
    Vpot=Vo
!
! POTENTIAL TRIANGULAR
! ELSE IF (x.LT.0.0d0) THEN
!     Vpot=-Vo*((x/Ro)+1.0d0)
! ELSE IF (x.GE.0.0d0) THEN
!     Vpot=-Vo*(1.0d0-(x/Ro))
! POTENTIAL HARMONIC
! IF (ABS(x).GT.Ro) THEN
!     Vpot=0.0d0
! ELSE IF (ABS(x).LT.Ro) THEN
!     Vpot=Vo*((x/Ro)**2-1.0d0)
! POTENTIAL DOUBLE-HARMONIC
!
! ELSE IF (x.LT.0) THEN
!     Vpot=4.0d0*Vo*((x/Ro)**2+(x/Ro))
! ELSE IF (x.GE.0) THEN
!     Vpot=4.0d0*Vo*((x/Ro)**2-(x/Ro))
ENDIF
RETURN
END

```



# Confinement potentials and ultracold atom trapping in atom chips: A numerical approach

J. Alonso López-Miranda<sup>1,2</sup>, R. Cabrera-Trujillo<sup>2,3</sup>, M. W. J. Bromley<sup>3,4</sup>, and B. D. Esry<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana, 09340, Iztapalapa, México*

<sup>2</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210, Cuernavaca, México*

<sup>3</sup>*Department of Physics, Kansas State University, Manhattan, Kansas 66506, USA*

<sup>4</sup>*Department of Physics and Computational Science Research Center, San Diego State University, San Diego, California 92182, USA*

## Abstract

The trapping of an ultracold gas by an atom chip-type system consisting of a straight one-dimensional wave guide with various defects is explored. The time-independent Gross-Pitaevskii equation that describes a Bose-Einstein condensate is used to calculate the maximum number of atoms,  $N_{max}$ , trapped by a wave guide potential. A simple analytical model is introduced for the wave function, and expressions for the maximum non-linear strength,  $g_{max}$ , are found for varying potential shapes, depths ( $V_0$ ) and characteristic lengths ( $R_0$ ). The number of atoms trapped in the guide is shown to behave according to a general scaling law that depends on the strength of the potential, *i.e.*,  $N_{max} \propto V_0 R_0$  across a wide range of parameters.

## 1 Introduction

Since the first Bose-Einstein condensates (BEC) were produced in 1995 [1, 2], interest in the physics of ultracold atoms has grown and new research areas have emerged. This in turn has created the need for new technology to study ultracold atoms. One such technology is *atom chips*. These chips may improve some atomic devices such as atomic clocks or allow the study of matter wave interference phenomena. Atom chips are based on magnetic fields created by micro-wire circuits and play an important role in cooling and trapping of BEC on the chip. In this way the ultracold wavepacket can be guided on these waveguides. At every perturbation (eg. a bend) of the waveguide, however, atoms can potentially become trapped, changing the interaction for any subsequent atom.

In the study of the structure of ultracold atoms is necessary to account for the interaction of the  $N$  atoms that form it. That is, each atom moves in an average field due to the other  $N - 1$  atoms

that surround it. This effective interaction is introduced into the Schrödinger equation in a mean field approximation which is known as the GPE [3, 4]. The nonlinear interaction is described by a term which is proportional to the  $s$ -wave scattering length,  $a_s$ , of interacting bosons. In one dimension (1-D), as is appropriate for a tight-waveguide, it is assumed that the longitudinal size of the ultracold BEC is larger than its transverse cross section. The 1-D GPE, in units of the transverse harmonic oscillator, is

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + g_{eff} |\Psi|^2 \right] \Psi(x, t). \quad (1)$$

In 1-D the constant  $g_{eff} = 4\pi \frac{a_s}{a_{\perp}} (N - 1)$ , where  $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$  is the oscillator unit length,  $m$  is the mass of the individual atoms that compose the BEC and  $\omega_{\perp}$  is the transverse frequency of the transverse waveguide.

The main goal in this work is to determine the general scaling law that determines the maximum number of atoms with  $a_s > 0$  that can be trapped



in a 1-D waveguide with various potentials  $V(x)$ . Firstly, some simple analytical approximations are developed. Secondly, the time-independent 1-D GPE is used to find the true ground state. By systematically adding more and more atoms into the potential, at some  $N_{max}$  the energy of the system becomes positive ( $\varepsilon > 0$ ), and thus the system is no longer bound. The  $N_{max}$  is seen to follow a scaling law that depends on the strength of the potential across a wide range of parameters.

## 2 Analytic results using the Thomas-Fermi approximation

The Thomas-Fermi approximation (TF) considers the limit of strong interactions between atoms that form an ultracold BEC, and allows for some useful expressions to be obtained. The TF approximation neglects the kinetic energy in the GPE and therefore the time-independent form is

$$[V(x) + g_{eff}|\Psi_{TF}(x)|^2] \Psi_{TF}(x) = \varepsilon \Psi_{TF}(x), \quad (2)$$

where  $\varepsilon$  is the chemical potential. To determine the maximum number of atoms that are bound in the potential, *i.e.*, when  $\varepsilon \rightarrow 0$ , Eqn. 2 reduces to

$$\Psi_{TF}(x) = \sqrt{\frac{\varepsilon - V(x)}{g_{eff}}} \rightarrow \sqrt{\frac{-V(x)}{g_{max}}}. \quad (3)$$

Through the normalization,  $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{TF}(x)|^2 dx = 1$ ,  $g_{max}$  can be found. Hence, for a given  $a_s$ ,  $m$  and  $\omega_{\perp}$ , the corresponding  $N_{max}$  can be determined.

The following four trapping potential shapes are considered here. For a square potential

$$V_a(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < R_0 \\ 0 & |x| > R_0, \end{cases} \quad (4)$$

for a triangle potential

$$V_b(x) = \begin{cases} -V_0 \left( \frac{x}{R_0} + 1 \right) & -R_0 < x < 0 \\ -V_0 \left( \frac{x}{R_0} - 1 \right) & 0 < x < R_0 \\ 0 & |x| > R_0, \end{cases} \quad (5)$$

for the (truncated) harmonic potential trap

$$V_c(x) = \begin{cases} -V_0 \left[ \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 - 1 \right] & |x| < R_0 \\ 0 & |x| > R_0, \end{cases} \quad (6)$$

while the similar double harmonic potential has

$$V_d(x) = \begin{cases} 4V_0 \left( \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 + \frac{x}{R_0} \right) & -R_0 < x < 0 \\ 4V_0 \left( \left( \frac{x}{R_0} \right)^2 - \frac{x}{R_0} \right) & 0 < x < R_0 \\ 0 & |x| > R_0. \end{cases} \quad (7)$$

From Eqn. 3, respectively each potential has

$$(N_{max} - 1)R_0 \approx \begin{cases} 2\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2, \\ \alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2, \\ \frac{4}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2, \\ \frac{3}{3}\alpha(\sqrt{V_0}R_0)^2. \end{cases} \quad (8)$$

where  $\alpha = a_{\perp}/(4\pi a_s)$ .

A more general, but still approximate, solution of the GPE has been found for the one-dimensional square potential well, *eg.* see Eqn. (21) in Ref. [5]. There it was found that

$$g_{max}(\gamma) \approx \frac{\gamma}{R_0} \left[ \sqrt{2} \left( \frac{e^{-\sqrt{2}\gamma}}{1 + 2e^{-\sqrt{2}\gamma} - e^{-2\sqrt{2}\gamma}} \right) + 2\gamma \right], \quad (9)$$

where  $\gamma = R_0\sqrt{V_0}$ . In the limit that  $\gamma \gg 1$ , the exponentials can be neglected and Eqn. 9 reduces to  $g_{max}(\gamma) = 2(R_0\sqrt{V_0})^2/R_0$ . This agrees with the TF approximation found for the case of the square potential. The other trapping potentials considered here appear to have no equivalent analytical solutions in the literature.

## 3 Numerical GPE solutions

Using finite differences and the Crank-Nicolson method [6, 7, 8], the numerical solutions to the time-independent GPE can be found for  $N_{max}$  without approximations and compared with the above results. These methods evolve the time-dependent GPE in time, requiring that the wave function at a given time to be discretized in space on a numerical grid, *viz.*  $\Psi(x_k, t_n) \rightarrow \Psi_k^n$ . The temporal evolution can be well approximated by separating the kinetic and potential energy terms by the split-operator method [8]

$$\Psi(x, t_0 + \Delta t) \cong e^{-i\Delta t\hat{T}/\hbar} e^{-i\Delta t\hat{V}/\hbar} \Psi(x, t_0). \quad (10)$$

The nonlinear Schrödinger equation (GPE) is then

$$\{\Psi_k^{n+1} - \nu(\Psi_{k+1}^{n+1} - 2\Psi_k^{n+1} + \Psi_{k-1}^{n+1})\} = \{f_k + \nu(f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1})\}. \quad (11)$$



where  $\nu = i\hbar\Delta t/(4m\Delta x^2)$ , and the potentials are in  $f_k = \exp(-i\Delta t[V(x_k) + g_{eff}|\Psi_k^n|^2/\hbar])\Psi_k^n$ .

Eqn. 11 can be written in matrix form as  $\mathbf{A}^+ \vec{\Psi}^{n+1} = \mathbf{A}^- \vec{f}$  where

$$\mathbf{A}^\pm = \begin{pmatrix} 1 \pm 2\nu & \mp\nu & 0 & \dots & 0 \\ \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \mp\nu & 1 \pm 2\nu & \mp\nu \\ 0 & \dots & 0 & \mp\nu & 1 \pm 2\nu \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Note that  $\mathbf{A}^\pm$  is a constant for fixed  $\Delta t$  and  $\Delta x$ . This method preserves the norm of the wave function and can be unconditionally stable for long times. Solution of these tridiagonal linear equations is obtained via the usual LU method [6].

Moreover, as only the ground state solutions are of interest here, the change of time is made to negative imaginary time, rendering the GPE into a diffusion equation that converges to the ground state. Such a solution is illustrated in Fig. 1 for a BEC with quite strong non-linearity ( $g_{eff} = 25$  but  $\varepsilon \ll 0$ ), that is trapped by a strong potential ( $V_0 = 50$  and  $R_0 = 1.0$ ). This is compared with the analytical wave-function of Carr *et al.* (see Eqn. (12) in Ref. [5]). The excellent agreement validates our basic numerical results. Also shown is the TF approximation of Eqn. 3, where the wave function takes the same shape as the potential, and is identically zero outside the well.

The main computational challenge is to, for a given  $V_0$  and  $R_0$ , incrementally increase  $g_{eff}$  to find  $g_{max}$ . As  $g_{eff}$  is increased, the wave function penetrates further into the classically forbidden region, until  $g_{eff} = g_{max}$  is reached, at which point the solution is no longer a physical Hilbert space function [5]. To determine the  $g_{max}$  (and hence  $N_{max}$ ) numerically thus requires that the discretized grid be large enough to contain the very slow exponential decay of wavefunctions with  $g_{eff} \rightarrow g_{max}$ .

## 4 Results and Scaling Laws

Representative results of the numerical procedure to determine  $N_{max}$ , were found by arbitrarily choosing the parameters  $V_0 = 5.0$  (u.o.),  $R_0 = 5.0$  (u.o.),  $a_s = 100$  (a.u. = atomic units), and

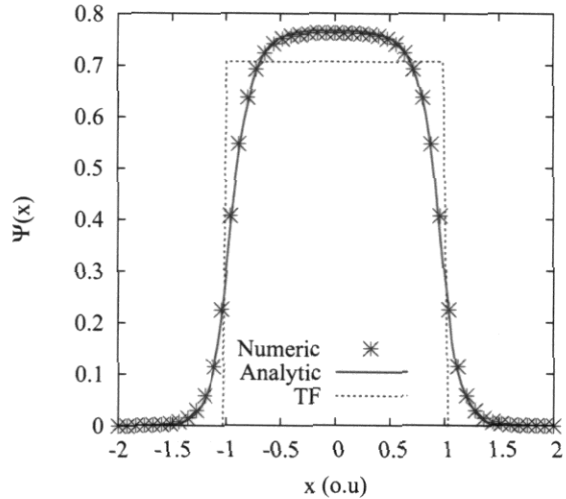


Figure 1: The computed GPE ground state wave function (\* symbols) in a square potential with  $g_{eff} = 25$ ,  $V_0 = 50$  and  $R_0 = 1.0$ . This is compared with the analytical wave function (solid line) [5], and the TF approximation of Eqn. 3.

$m = 87m_p$  (a.u.) so  $\alpha = 300$ . Under these conditions, the square well trap holds the most atoms, 12,712. The harmonic well traps 8,471 atoms, the triangular potential traps 6,356 particles, while the double harmonic only traps 4,231 atoms. The relative ratio of 3.004 : 2.002 : 1.502 : 1 is in agreement with the TF approximation Eqn. 8. This is due to the large potential strength  $V_0R_0$  which requires a large number of atoms to fill up the potential, *i.e.*, the system is in a strong nonlinearity regime where the TF approximation is valid.

The general  $N_{max}$  scaling laws are presented here for two series: the first case in Fig. 2 has  $g_{max} < 1$  (*i.e.*, small potential strengths  $V_0R_0$ ) while the second set in Fig. 3 have  $g_{max} \gg 1$  (*i.e.*, large  $V_0R_0$ ). For the first series,  $a_s = 100$  (a.u.)  $\omega_\perp = 2\pi 100$  (rad s<sup>-1</sup>) and  $m = 87m_p$  ( $m_p$  proton mass) were all fixed so the gas is weakly-interacting ( $\alpha = 32.4$ ). The various  $V_0$  were chosen along with  $R_0 = 0.5, 1, 2, 3, 5, 7, 10, 15$ , and 20 to span the parameter space.

The results in Fig. 2 are for various square well potentials. The numerical results track both the approximate analytical solution of Eqn. 9 [5], and the TF approximation of Eqn. 8 over many orders of magnitude. In the region where the non-linear constant is extremely small,  $g_{max} =$



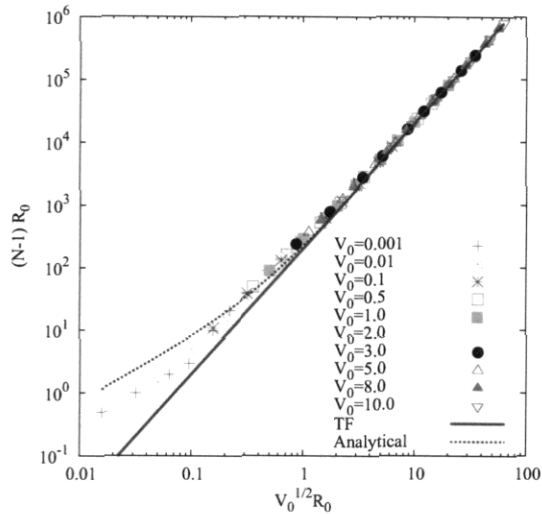


Figure 2: Scaling law of the maximum number of atoms,  $N_{max}$ , trapped by square well potentials of various lengths  $R_0$  and depths  $V_0$  for a weakly interacting gas. The numerical results (various symbols) are compared with an approximate analytical solution Eqn. 9 [5] (solid line) along with the TF approximation of Eqn. 8 (dashed line).

$0.0308(N-1) \ll 1$ , the analytical results begin to diverge from the (converged) calculations. This is to be expected since their assumptions made, eg. by neglecting the kinetic energy, become far from valid.

The maximum number of atoms trapped by the four potentials are compared in Fig. 3. The TF analytical results remain valid over a wide-range of trap parameters for each of the various potentials.

In conclusion, by means of the TF approximation at  $\varepsilon = 0$ , one can determine the non-linear interaction strength  $g_{max}$  and the maximum number of atoms that can be trapped by a 1-D potential. The scaling laws of Eqn. 8 are linearly dependent on both the depth and length of the potential, and remain valid over a surprisingly wide-range of parameters. Such a scaling law is important because it captures, in a simple expression, the number of atoms of an ultracold BEC that can be trapped by a waveguide with a potential on an atom chip.

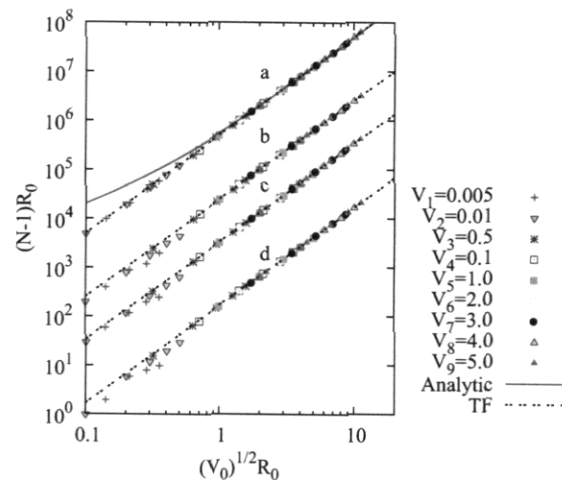


Figure 3: Scaling laws for the four different trap shapes. The plot organisation is the same as that of Fig. 2, except that the  $y$ -axis now corresponds to (a) the square well potentials multiplied by a factor of 1000, (b) the triangular potentials  $\times 100$ , (c) the harmonic potentials  $\times 10$ , and (d) the double harmonic potentials.

## Acknowledgments

This work is supported by projects PAPIIT-UNAM IN 107 108 and CONACyT-SNI 89607.

## References

- [1] M.H. Anderson *et al.*, Science, **269**, 198 (1995).
- [2] K.B. Davis *et al.*, Phys. Rev. Lett., **75**, 22 (1995).
- [3] E.P. Gross, J. Math. Phys., **4**, 195 (1963).
- [4] L.P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP, **13**, 451 (1961) [Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 646 (1961)]
- [5] L.D. Carr, K.W. Mahmud, and W.P. Reinhardt, Phys. Rev. A, **64**, 033603 (2001).
- [6] W.H. Press *et al.*, *Numerical Recipes in FORTRAN 77*, Cambridge University Press (1986).
- [7] A. Goldberg, H.M. Schey, and J.L. Schwartz, Am. J. Phys, **35**, 177 (1967).
- [8] M.W.J. Bromley and B.D. Esry., Phys. Rev. A, **69**, 053620 (2004).





# Bibliografía

- [1] D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Experimental studies of bose-einstein condensation. *Optics Express*, 2, 1998.
- [2] S.N. Bose. *Z. Phys.*, 26:178, 1924.
- [3] A. Einstein. *Sitzungsberg. Phys. Math*, 1:3, 1925.
- [4] Wolfgang Ketterle. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-einstein condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phys.*, 74(4):1131–1151, Nov 2002.
- [5] E. Tiesinga, A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar, and H. T. C. Stoof. Conditions for bose-einstein condensation in magnetically trapped atomic cesium. *Phys. Rev. A*, 46(3):R1167–R1170, Aug 1992.
- [6] H. M. J. M. Boesten, J. M. Vogels, J. G. C. Tempelaars, and B. J. Verhaar. Properties of cold collisions of  $^{39}k$  atoms and of  $^{41}k$  atoms in relation to bose-einstein condensation. *Phys. Rev. A*, 54(5):R3726–R3729, Nov 1996.
- [7] J. L. Roberts, N. R. Claussen, James P. Burke, Chris H. Greene, E. A. Cornell, and C. E. Wieman. Resonant magnetic field control of elastic scattering in cold  $^{85}rb$ . *Phys. Rev. Lett.*, 81(23):5109–5112, Dec 1998.
- [8] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269, 1995.
- [9] M. R. Andres N. J. van Druten D. S. Durfee D. M. Kurn K. B. Davis, M. O. Mewes and W. Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Letter*, 75(22):3969–3973, Nov 1995.
- [10] <http://www.uibk.ac.at/exphys/ultracold/atomtraps.html>. Página web con links de grupos de investigación en el mundo que trabajan con trampas atómicas.
- [11] Cohen-Tannoudji and Claude N. Nobel lecture: Manipulating atoms with photons. *Rev. Mod. Phys.*, 70(3):707–719, Jul 1998.
- [12] William D. Phillips and Harold Metcalf. Laser deceleration of an atomic beam. *Phys. Rev. Lett.*, 48(9):596–599, Mar 1982.

- [13] Steven Chu. Nobel lecture: The manipulation of neutral particles. *Rev. Mod. Phys.*, 70(3):685–706, Jul 1998.
- [14] E. A. Cornell and C. E. Wieman. Nobel lecture: Bose-einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. *Rev. Mod. Phys.*, 74(3):875–893, Aug 2002.
- [15] N. Masuhara, J. M. Doyle, J. C. Sandberg, D. Kleppner, T. J. Greytak, H. F. Hess, and G. P. Kochanski. Evaporative cooling of spin-polarized atomic hydrogen. *Phys. Rev. Lett.*, 61(935), 1988.
- [16] M. R. Andrews. Observation of interference between two bec. *Science*, 275:637–641, 1997.
- [17] T. Schumm, S. Hofferberth, L. M. Anderson, S. Wildermuth, S. Groth, I. Bar-Joseph, J. Schmiedmayer, and P. Krüger. Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip. *Nature*, 1:57–62, 2005.
- [18] W. Hänsel, J. Reichel, P. Hommelhoff, and T. W. Hänsch. Trapped-atom interferometer in a magnetic microtrap. *Phys. Rev. A*, 64(6):063607, Nov 2001.
- [19] E. W. Hagley, L. Deng, M. Kozuma, J. Wen, K. Helmerson, S. L. Rolston, and W. D. Phillips. A well-collimated quasi-continuous atom laser. *Science*, 283(5408):1706–1709, 1999.
- [20] J. Reichel, W. Hänsel, and T. W. Hänsch. Atomic micromanipulation with magnetic surface traps. *Phys. Rev. Lett.*, 83(17):3398–3401, Oct 1999.
- [21] J. H. Thywissen, M. Olshanii, G. Zabow, M. Drndic, R. M. Westervet K. S. Johnson, , and M. Prentiss. Microfabricated magnetic waveguides for neutral atoms. *Eur. Phys. J. D.*, 7:361–367, 1999.
- [22] W. Hänsel, P. Hommerlhoff, and T. W. Hänsch. Magnetic conveyor belt for transporting and merging trapped atom clouds. *Phys. Rev. Lett.*, 86:608–611, 2001.
- [23] József Fortágh and Claus Zimmermann. Magnetic microtraps for ultracold atoms. *Rev. Mod. Phys.*, 79(1):235–289, 2007.
- [24] J. Fortágh, H. Ott, A. Grossmann, and C. Zimmermann. Miniaturized magnetic guide for neutral atoms. *Appl. Phys. B: Lasers Opt.*, 70(1):701–708, 2000.
- [25] J. Forágh, H. Ott, S. Kraft, A. Günther, and C. Zimmermann. Surface effects in magnetic microtraps. *Phys. Rev. A*, 66, 2002.
- [26] J. Forágh, H. Ott, S. Kraft, A. Günther, and C. Zimmermann. Bose-einstein condensates in magnetic waveguides. *Appl. Phys. B: Lasers Opt.*, 76, 2003.
- [27] J. Forágh, H. Ott, B. Herzog, D. Wharam, and C. Zimmermann. Microelectromagnets for trapping and manipulating ultracold atomic quantum gases. *Appl. Phys. Lett.*, 81, 2002.

- [28] M. W. J. Bromley and B. D. Esry. Propagation of ultracold atoms through bends in waveguides. *Phys. Rev. A*, 68(4), Oct 2003.
- [29] M. W. J. Bromley and B. D. Esry. Manifestations of vortices during ultracold-atom propagation through waveguides. *Phys. Rev. A*, 70(1), Jul 2004.
- [30] R. Reifh. *Fundamentals Of Statistical and Thermal Physics*. McGraw Hill, 1965.
- [31] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer-Verlag, 1995.
- [32] R.K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Butterworth-Heinemann, second edition, 2001.
- [33] George B. Arfken and Hans J. Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 5th. edition, 2001.
- [34] N. H. Dekker, C. S. Lee, V. Lorent, J. H. Thywissen, S. P. Smith, M. Drndic, R. M. Westervelt, and M. Prentiss. Guiding neutral atoms on a chip. *Phys. Rev. Lett.*, 84(6):1124–1127, Feb 2000.
- [35] H. Ott, J. Fortagh, G. Schlotterbeck, A. Grossmann, and C. Zimmermann. Bose-einstein condensation in a surface microtrap. *Phys. Rev. Lett.*, 87(23):230401, Nov 2001.
- [36] M. Key, I. G. Hughes, W. Rooijackers, B. E. Sauer, E. A. Hinds, D. J. Richardson, and P. G. Kazansky. Propagation of cold atoms along a miniature magnetic guide. *Phys. Rev. Lett.*, 84(7):1371–1373, 2000.
- [37] S. Groth, P. Krüger, S. Wildermuth, R. Folman, T. Fernholz, J. Schmiedmayer, D. Mahalu, and I. Bar-Joseph. Atom chips: Fabrication and thermal properties. *Applied Physics Letters*, 85(14):2980–2982, 2004.
- [38] Donatella Cassettari, Björn Hessmo, Ron Folman, Thomas Maier, and Jörg Schmiedmayer. Beam splitter for guided atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 85(26):5483–5487, Dec 2000.
- [39] T. Fernholz, R. Gerritsma, S. Whitlock, I. Bard, and R. J. C. Spreeuw. Fully permanent magnet atom chip for bec. *Phys. Rev. A*, 86:608–611, 2008.
- [40] C. J. Vale, B. Upcroft, M. J. Davis, N. R. Heckenberg, and H. Rubinztein-Dunlop. Foil-based atom chip for bec. *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, 37:2959–2967, 2004.
- [41] C. Roux, A. Emmert, A. Lupascu, T. N̄irrengarten, G. N̄ogues, M. Brune, J.M. Raimond, and S. Haroche. Bose-einstein condensation on a superconducting atom chip. *Europhysics Letters*, 81(5):56004, 2008.
- [42] Shengwang Du, Matthew B. Squires, Yutaka Imai, Leslie Czaia, R. A. Saravanan, Victor Bright, Jakob Reichel, T. W. Hänsch, and Dana Z. Anderson. Atom-chip bose-einstein condensation in a portable vacuum cell. *Phys. Rev. A*, 70(5):053606, Nov 2004.

- [43] V. I. Balykin, V. G. Minogin, and V. S. Letokhov. Electromagnetic trapping of cold atoms. *Reports on Progress in Physics*, 63(9):1429–1510, 2000.
- [44] R. Folman, P. Krueger, J. Schmiedmayer, J. Denschlag, and C. Henkel. Microscopic atom optics: from wires to an atom chip. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 48:263, 2002.
- [45] J. D. Weinstein and K. G. Libbrecht. Microscopic magnetic traps for neutral atoms. *Phys. Rev. A*, 52(5):4004–4009, Nov 1995.
- [46] Johannes Denschlag, Donatella Cassettari, and Jörg Schmiedmayer. Guiding neutral atoms with a wire. *Phys. Rev. Lett.*, 82(10):2014–2017, 1999.
- [47] D. Cassettari, A. Chenet, R. Folman, A. Haase, B. Hessmo, P. Krüger, T. Maier, S. Schneider, T. Calarco, and J. Schmiedmayer. Micromanipulation of neutral atoms with nanofabricated structures. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 70:721–730, 2000.
- [48] G. Birkl and J. Fortágh. Micro traps for quantum information processing and precision force sensing. *Laser and Photonic Review*, 1:12–23, 2007.
- [49] A. Günther, M. Kemmler, S. Kraft, C. J. Vale, C. Zimmermann, and J. Fortágh. Combined chips for atom-optics. *Phys. Rev. A*, 71(063619), 2005.
- [50] A. Günther, S. Kraft, C. Zimmermann, and J. Fortágh. Atom interferometer based on coherent splitting of bose-einstein condensates with an integrated magnetic grating. *arxiv:cond-mat/0603631*, 2006.
- [51] E. A. Hinds, C. J. Vale, and M. G. Boshier. Two-wire waveguide and interferometer for cold atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 86(8):1462–1465, Feb 2001.
- [52] T. Schumm, S. Hofferberth, L. M. Andersson, S. Wildermuth, S. Groth, I. Bar-Joseph, J. Schmiedmayer, and P. Krüger. Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip. *Nature Physics*, 1:57–62, 2005.
- [53] Y. Shin, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard, and A. E. Leanhardt. Atom interferometry with bose-einstein condensates in a double-well potential. *Phys. Rev. Lett.*, 92(5):050405, Feb 2004.
- [54] Ying-Ju Wang, Dana Z. Anderson, Victor M. Bright, Eric A. Cornell, Quentin Diot, Tetsuo Kishimoto, Mara Prentiss, R. A. Saravanan, Stephen R. Segal, and Saijun Wu. Atom michelson interferometer on a chip using a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 94(9):090405, Mar 2005.
- [55] Ron Folman, Peter Krüger, Donatella Cassettari, Björn Hessmo, Thomas Maier, and Jörg Schmiedmayer. Controlling cold atoms using nanofabricated surfaces: Atom chips. *Phys. Rev. Lett.*, 84(20):4749–4752, May 2000.
- [56] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, 2002.

- [57] Eugene P. Gross. Hydrodynamics of a superfluid condensate. *Journal of Mathematical Physics*, 4(2):195–207, 1963.
- [58] L. P. Pitaevskii. *Sovietic Physics JETP*, 13(451), 1961.
- [59] L. D. Carr, Charles W. Clark, and W. P. Reinhardt. Stationary solutions of the one-dimensional nonlinear schrödinger equation. i. case of repulsive nonlinearity. *Phys. Rev. A*, 62(6):063610, Nov 2000.
- [60] Anthony J. Leggett. Bose-einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Rev. Mod. Phys.*, 73(2):307–356, Apr 2001.
- [61] Alexander L. Fetter. Rotating trapped bose-einstein condensates. *LATIN-AMERICAN SCHOOL OF PHYSICS XXXVIII: Quantum Information and Quantum Cold Matter*, 994(1):98–99, 2008.
- [62] Harald Friedrich. *Theoretical Atomic Physics*. 2nd. edition, 1998.
- [63] Eugen Merzbacher. *Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons., second edition, 1970.
- [64] C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet. Bose-einstein condensation of lithium: Observation of limited condensate number. *Phys. Rev. Lett.*, 78(6):985–989, Feb 1997.
- [65] Gordon Baym and C. J. Pethick. Ground-state properties of magnetically trapped bose-condensed rubidium gas. *Phys. Rev. Lett.*, 76(1):6–9, 1996.
- [66] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii, and Sandro Stringari. Theory of bose-einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, 71(3):463–512, Apr 1999.
- [67] C. J. Pethick E. Lundh and H. Smith. Zero-temperature properties of a trapped bose-einstein-condensed gas: beyond the thomas-fermi approximation. *Phys. Rev. A*, 55(3):2126–2131, 1997.
- [68] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. National Bureau of Standards Applied Mathematics Series 55., 1972.
- [69] L. D. Carr, K. W. Mahmud, and W. P. Reinhardt. Tunable tunneling: An application of stationary states of bose-einstein condensates in traps of finite depth. *Phys. Rev. A*, 64(3):033603, Aug 2001.
- [70] Hidenori Hasimoto and Hiroaki Ono. Nonlinear modulation of gravity waves. *Journal of the Physical Society of Japan*, 33(3):805–811, 1972.
- [71] Claudio Conti, Marco Peccianti, and Gaetano Assanto. Route to nonlocality and observation of accessible solitons. *Phys. Rev. Lett.*, 91(7):073901, Aug 2003.

- [72] B. T. Seaman, L. D. Carr, and M. J. Holland. Effect of a potential step or impurity on the bose-einstein condensate mean field. *Phys. Rev. A.*, 71(3):033609, 2005.
- [73] Weizhu Bao, Dieter Jaksch, and Peter A. Markowich. Numerical solution of the gross-pitaevskii equation for bose-einstein condensation. *Journal Computation Physics*, 187(1):318–342, 2003.
- [74] Hanquan Wang. Numerical studies on the split-step finite difference method for nonlinear schrödinger equations. *Applied Mathematics and Computation*, 170:17–35, 2005.
- [75] V. A. Trofimov and N. V. Peskov. Comparison of finite difference schemes for gross-pitaevskii equation. *Math. Mod. Anal.*, 14(1), 2009.
- [76] Remigio Cabrera-Trujillo. Colisiones atómicas asistidas por láser. *XV Escuela de verano en Física. ICF-UNAM*, julio-agosto 2007.
- [77] Daekyoung Kang and E. Won. Precise numerical solutions of potential problems using the crank-nicolson method. *J. Comput. Phys.*, 227(5):2970–2976, 2008.
- [78] M. L. Chiofalo, S. Succi, and M. P. Tosi. Ground state of trapped interacting bose-einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm. *Phys. Rev. E*, 62(5):7438–7444, Nov 2000.
- [79] Patrick L. Nash and L. Y. Chen. Efficient finite difference solutions to the time-dependent schrödinger equation. *Journal Computation Physics*, 130(2):266–268, 1997.
- [80] N. Watanabe and M. Tsukada. *Phys. Rev. E*, 62:2914, 2000.
- [81] A. Goldberg, H. M. Schey, and J. L. Schwartz. *Am. J. Phys*, 35, 1977.
- [82] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling. *Numerical Recipes in fortran 77*. Cambridge University Press, Cambridge, 1986.
- [83] R. L. Burden and J. Douglas Faires. *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamérica, 2003.
- [84] R. Resnick and R. Eisberg. *Quantum Physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles*. John Wiley and Sons., second edition, 1985.

# Índice alfabético

- átomos alcalinos, 17, 30, 39  
átomos ultra-fríos, 12
- acoplamiento débil, 72  
acoplamiento fuerte, 72
- bias, campo magnético de sesgo, 31  
Biot-Savart, 33  
Bohr, magnetón de, 30  
Bose, S. N., 17  
bosones, 11, 18, 22
- campo promedio, 41  
Cayley, método de, 59  
chip atómico, 15, 28, 29, 36  
colisión binaria, 39  
condensado de Bose-Einstein, 12, 17, 23, 26  
Crank-Nicolson, 59
- de Broglie, longitud de onda, 11, 26  
diferencias finitas, 39, 52  
diferencias finitas, derivada hacia atrás, 53  
diferencias finitas, derivada hacia adelante, 53  
diferencias finitas, derivadas temporales, 54  
diferencias finitas, ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, 57  
diferencias finitas, ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, 55  
diferencias finitas, integrales, 55  
diferencias finitas, segunda derivada, 54  
diferencias finitas, split operator, 59  
dispersión de un paquete de onda gaussiano, 63  
distribuciones cuánticas, 19  
ecuación de difusión, 58
- ecuación de Schrödinger con tiempo-imaginario, 58  
Einstein, A., 17  
energía de Fermi, 22  
enfriamiento Doppler, 14  
enfriamiento evaporativo, 15  
espín, 11, 17  
estadística de Bose-Einstein, 18, 22  
estadística de Fermi-Dirac, 18, 21  
estadísticas cuánticas, 17
- fermiones, 11, 18, 21  
fracción de partículas, en el estado base de un CBE, 26  
fuerza magnética, 31  
función de onda para potenciales de confinamiento, 72  
función de onda para un paquete gaussiano, 62  
función de onda, boson, 18  
función de onda, fermión, 18  
función de partición canónico, 20  
función de partición, Bose-Einstein, 23  
función de partición, Fermi-Dirac, 22
- gas cuántico, 12  
gran función de partición del ensamble gran canónico, 20  
Gross-Pitaevskii, ecuación de, 16, 39, 51  
guía de onda de materia, 16, 28  
guías de onda, 16, 31
- Hartree-Fock, aproximación de, 40  
interacción magnética, 30  
límite adiabático, 30, 33  
Landé, factor de, 30

- Larmor, precesión de, 30  
 ley de escalamiento, 73  
 LU, método de inversión, 60  
  
 método implícito de Crank-Nicolson, 60  
 matriz tridiagonal simétrica, 56  
 melaza óptica, 14  
 micro-trampas magnéticas, 16, 31  
 momento dipolar magnético, 30  
  
 número cuántico  $F$ , 31  
 número de ocupación, bosones, 23  
 número de ocupación, fermiones, 22  
 número de partículas ligadas en un pozo cuadrado, 48  
  
 offset, campo magnético, 33  
 onda de materia, 28, 35  
 ondas planas, 62  
  
 partícula libre, 61  
 potencial de confinamiento armónico, 50, 70  
 potencial de confinamiento cuadrado, 46, 68  
 potencial de confinamiento doble armónico, 50, 70  
 potencial de confinamiento triangular, 49, 69  
 potenciales de atrapamiento, 39  
 potenciales de confinamiento, 46  
 potenciales de confinamiento en guías de onda de materia, 65  
 principio de exclusión de Pauli, 11, 17  
 propagación de un paquete gaussiano, 61  
 propagador temporal, 58  
  
 red numérica, 52  
 reflexión de una partícula, 61  
 rubidio, CBE, 27  
  
 Schrödinger, ecuación no lineal de, 39, 51  
 side guide, 31  
 sodio, CBE, 27  
 split-operator, 59  
 strong field seeking, SFS, 31  
  
 temperatura crítica de condensación, 26  
 temperatura crítica del sodio, 27  
 Thomas-Fermi, aproximación de, 45, 72  
 trampa magnética, 14, 28, 30  
 trampas magneto-ópticas, MOT, 14  
 transmisión de una partícula, 61  
 two guide, 33  
  
 U, guía de onda, 34  
  
 weak field seeking, WFS, 31  
  
 X, guía de onda, 34  
 Y, guía de onda, 34  
 Z, guía de onda, 34  
 Zeeman, efecto, 30