



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

**“GASES DE FERMÍ INTERACTUANTES Y  
ATRAPADOS.”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**DOCTORA EN CIENCIAS (FÍSICA)**

PRESENTA:

**LAURA ELENA CASANDRA ROSALES ZÁRATE**

DIRECTOR DE TESIS:

DRA. ROCÍO JÁUREGUI RENAUD

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. OCTAVIO CASTAÑOS GARZA

MIEMBRO DE COMITÉ TUTORAL: DR. GENARO TOLEDO SÁNCHEZ



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

MÉXICO, D.F.

2010



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

*A mis padres por ser mi mejor  
ejemplo.*

*A mis hermanas por su compañía.*

*A Mirtli porque es mi alegría.*

# Agradecimientos.

*En esta sección quisiera agradecer a todos aquellos que de alguna forma contribuyeron a que concluyera mi trabajo de tesis, por lo que hay tanto agradecimientos académicos como personales.*

*A la Dra. Rocío Jáuregui, por haberme aceptado como su alumna, por todo el tiempo que me ha dedicado, con ella he aprendido mucha física, además de su forma de trabajo. Quiero agradecerle por la pasión con la que explica el tema, que espero haberla heredado y por haberme apoyado tanto durante todo el posgrado, puesto que gracias a ella pude asistir a diversas escuelas internacionales así como congresos.*

*A mis sinodales: Dr. Eduardo Gómez, Dr. Luis Benet, Dr. Víctor Romero, Dr. Rosalío Rodríguez, Dra. María de los Angeles, Dr. Octavio Castaños y Dra. Rocío Jáuregui, por el tiempo dedicado a la lectura y corrección del presente trabajo, por sus comentarios, muchos de los cuales me hicieron pensar en como explicaba las cosas, gracias a ellos este trabajo mejoró considerablemente.*

*Al Dr. Genaro Toledo, que fue un gran apoyo para mí en mi doctorado, que junto con la Dra. Rocío me enseñó a programar y con quien discutí varias de mis dudas. Además, el programa principal que utilicé para obtener los resultados de la presente tesis se basó en uno diseñado por él.*

*A la Dra. Rosario Paredes, que conozco desde que me impartió clases y con quien tuve el gusto de colaborar en este maravilloso tema.*

*A los profesores de la facultad y del posgrado que me impartieron clase, y que contribuyeron a mi formación.*

*Al Dr. Oscar Rosas por permitirme ser su ayudante, y por el trato que siempre me brindó. Al Dr. Camarillo por que siempre ha sido amable conmigo.*

*Gracias a la UNAM, a esta maravillosa universidad que me ha forjado como profesionista.*

*Al Instituto de Física que me brindó un lugar para trabajar. Gracias a Liz y a Mary que siempre estuvieron dispuestas a ayudarme.*

*Al posgrado en Ciencias Físicas, por su apoyo durante mis estudios, en especial a Yanalté por su apoyo en los trámites y al Coordinador, el Dr. Manuel Torres.*

*A CONACYT, por el apoyo económico que me brindó durante mis estudios de posgrado, a través de una beca.*

*A DGAPA-UNAM por el apoyo que me brindó a través del proyecto IN-111109.*

*A Dios, no estaría aquí sin él.*

*A mis papás, por ser un gran ejemplo para mí, por su apoyo desde que decidí estudiar esta carrera, por su confianza, por enseñarme muchas cosas de la vida y por animarme a seguir adelante.*

*A mis hermanas, Kitty, Betty y Mine, por su compañía, apoyo, por aguantarme, que muchas veces no es fácil, por desestresarme y todos los ratos de alegría que hemos compartido.*

*A Miztli, @=)@, por el apoyo incondicional que me ha brindado siempre, por su compañía, por sus consejos, por las muchas pláticas, momentos agradables, paseos, y por hacerme muy feliz. También por aguantarme. Este trabajo no hubiera sido lo mismo sin tí.*

*A Vasthi por que siempre ha sido una gran amiga, y que a pesar de la distancia en estos últimos años siempre ha estado a mi lado. La carrera no hubiera sido lo mismo sin tí y sin el joven Hugo, por todas las horas de estudio que pasamos en la biblio y por el tiempo que pasamos en tu casa.*

*A Nacho, el Men, por tantos tours gastronómicos, por organizar los viajes, por ponernos nombres chistosos y por hacerme reír.*

*A Arlette, por ser mi amiga desde hace tanto tiempo y con quien siempre cuento.*

*A mis amigos, con quienes he compartido tantas cosas, no solo estudio, sino viajes, risas, comidas, pláticas, tantas cosas, mi vida no sería la misma sin ustedes, todos ustedes son importantes para mí: Vasthi, Hugüito, Miztli, Nacho, Cristtel, Leonor, César, Mercedes, Cynthia, Lucía y Selene.*

*A Carlos, Kenya y Milton, que en estos últimos tres años han sido un gran apoyo para mí, por aquellos días del café, donde hemos platicado mucho y además me he divertido mucho y sobre todo me he reído tanto con ustedes.*

*A Manuel, Miguel, Marusia, Preisser, Azael, Daniela, la hermandad del agua de Azael, Jonathan, Kike, Olivia, el Chango, Luis, Nadia, Pamela, Fanny, Roberto, Jorge, Sirio, Octavio, Román y Andrea, algunos de los cuales conocí en la facultad y otros en el posgrado; y con los que los que conviví en diferentes etapas de mi vida.*

*A Carlos López, Natorro, por su ayuda técnica con el cluster ollin y por su ayuda para arreglar mi compu.*

*Al entrenador, Guillermo Parra, porque siempre me animó a ir al gym y no dejarlo.*

*A la Sra. Martha, Flavianna y Marquitos por su apoyo con mi familia, sobre todo con mi mamá.*

*A los papás de Vasthi, Arlette, Miztli y Carlos respectivamente, por su amabilidad y hospitalidad conmigo.*

*A Cerbe, Cerberus, porque siempre que llego a casa me recibe con mucha alegría y me hace fiesta. A Mera por ser muy graciosa.*

*A los alumnos de los cuales fui ayudante de electro y de física atómica, con ustedes aprendí que fue dar algunas clases.*

# Índice general

<b>Índice general</b>	<b>v</b>
<b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>1 Teoría de la dispersión.</b>	<b>11</b>
1.1 Dispersión de un solo canal. . . . .	11
1.1.1 Descripción y conceptos fundamentales. . . . .	11
1.1.2 Dispersión a bajas energías. . . . .	17
1.1.3 Método de fase variable. . . . .	21
1.2 Modelo de la dispersión en un sistema de canales acoplados. . . . .	24
1.2.1 Descripción general. . . . .	24
1.2.2 Formalismo de los operadores de proyección y tipos de resonancias. . . . .	27
1.3 Resonancias de Feshbach en átomo ultrafríos. . . . .	31
1.3.1 Historia y descripción experimental. . . . .	31
1.3.2 Descripción teórica. . . . .	33
1.3.3 Resonancias anchas y angostas. . . . .	37
<b>2 Métodos experimentales para la generación de gases ultrafríos.</b>	<b>39</b>
2.1 Métodos de confinamiento. . . . .	39
2.1.1 Trampas magnéticas. . . . .	40
2.1.2 Trampa dipolar óptica. . . . .	43
2.1.3 Trampa magnético-óptica. . . . .	45
2.2 Métodos de enfriamiento. . . . .	46
2.2.1 Enfriamiento láser. . . . .	47
2.2.2 Enfriamiento evaporativo. . . . .	53
2.3 Historia y descripción de los experimentos en los gases de Fermi. . . . .	55
<b>3 Termodinámica del gas de Fermi ideal.</b>	<b>61</b>
3.1 Gas de Fermi ideal confinado en una caja de volumen $V$ . . . . .	61
3.2 Gas de Fermi confinado en una trampa armónica. . . . .	67

3.3	Consecuencias debidas al potencial de confinamiento externo. . . . .	72
<b>4</b>	<b>Sistema de dos fermiones interactuantes y confinados por medio de una trampa armónica.</b>	<b>77</b>
4.1	Introducción. . . . .	77
4.2	Potenciales efectivos como modelo de la interacción. . . . .	78
4.2.1	Potencial de contacto. . . . .	79
4.2.2	Potenciales de corto alcance. . . . .	81
4.3	Sistema de dos partículas interactuantes sin potencial de confinamiento. . .	82
4.4	Sistema de dos partículas interactuantes y atrapadas. . . . .	83
4.4.1	Energías. . . . .	86
4.4.2	Eigenfunciones. . . . .	91
4.5	Dos partículas atrapadas que interactúan mediante el potencial regularizado.	93
4.6	Comparación entre los potenciales de interacción de corto alcance y el potencial delta regularizado. . . . .	97
<b>5</b>	<b>Gases de Fermi interactuantes y atrapados.</b>	<b>99</b>
5.1	Gas de Fermi de dos componentes en onda- <i>s</i> . . . . .	100
5.1.1	Gas de Fermi con interacción débil. . . . .	100
5.1.2	Gases de Fermi con interacción fuerte. . . . .	111
5.1.3	Otros métodos para la descripción de los gases atómicos ultrafríos. .	120
5.2	Modelo de sistema de un gas de Fermi de dos componentes. . . . .	122
5.3	Método Monte-Carlo variacional. . . . .	123
5.3.1	Funciones de onda prueba tipo Jastrow-Slater. . . . .	126
5.3.2	Funciones de onda prueba tipo Eagles-Leggett. . . . .	132
<b>6</b>	<b>Resultados numéricos para las regiones BEC, BCS y el cruce.</b>	<b>137</b>
6.1	Curvas de energía. . . . .	138
6.2	Teorema del virial para gases ultrafríos confinados. . . . .	144
6.2.1	Relaciones del virial para un potencial de corto alcance. . . . .	144
6.2.2	Relaciones del virial para el potencial exponencial. . . . .	147
6.2.3	Resultados numéricos. . . . .	149
6.3	Propiedades del Gas. . . . .	152
6.3.1	Densidades y correlaciones. . . . .	152
6.3.2	Gas de Fermi en el límite de unitariedad . . . . .	158
6.4	Límite de rango cero. . . . .	162
<b>7</b>	<b>Conclusiones.</b>	<b>167</b>
<b>A</b>	<b>Programa para calcular la longitud de dispersión.</b>	<b>171</b>
<b>B</b>	<b>Polinomios para la región BCS.</b>	<b>175</b>

<b>ÍNDICE GENERAL</b>	<b>1</b>
<b>C Cálculo de la amplitud del potencial.</b>	<b>181</b>
<b>D Estructura del programa Monte-Carlo variacional.</b>	<b>183</b>
<b>E Ejemplo de la salida del programa.</b>	<b>187</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>191</b>



# Resumen

En el presente trabajo, se estudia una mezcla balanceada de  $2N$  átomos fermiónicos en dos diferentes estados de espín, confinados por medio de una trampa armónica isotrópica de frecuencia  $\omega$  y que interactúan a través de un potencial de corto alcance. La descripción que se realiza es en el caso de temperatura cero. El potencial de interacción está caracterizado por medio de dos parámetros: la amplitud y el alcance del potencial. El parámetro efectivo que define las interacciones en este sistema es la longitud de dispersión, y dependiendo del valor y del signo de este parámetro se pueden definir tres regiones de estudio: La región BCS, donde la longitud de dispersión es negativa y hay formación de pares de fermiones conocidos como pares de Cooper, la región BEC donde la longitud de dispersión es positiva y hay formación de moléculas y el cruce BCS-BEC, esta región es donde el gas interactúa fuertemente y hay una zona conocida como límite de unitariedad donde la longitud de dispersión diverge.

Se escoge el método Monte-Carlo variacional, para poder determinar las eigenfunciones y eigenenergías del sistema. En cada una de las regiones antes mencionadas, se propone una función de onda prueba la cual depende de un parámetro variacional. En el límite BEC y en el cruce BEC-BCS, la base de funciones de onda prueba para el sistema de muchos cuerpos, es una función de onda antisimetrizada, construída a partir de un producto de funciones de pares de partículas, que son soluciones del problema de dos cuerpos atrapados e interactuantes. En este trabajo, se obtiene una expresión para la acción del hamiltoniano sobre esta función de onda prueba, que se puede programar con el método Monte Carlo y que permite hacer simulaciones para un número grande de partículas. Para el régimen BCS se utiliza una función de muchos cuerpos basada en funciones de onda de un solo cuerpo más correcciones asociadas a la correlación de dos cuerpos entre partículas.

Para un valor dado del alcance del potencial, se encontraron los valores de la energía y del correspondiente parámetro variacional, con lo que se determinan las funciones de onda. Una vez que se conocen las soluciones de este problema, se analizan las diferentes propiedades del gas de Fermi, determinadas por las funciones de correlación de una y de dos partículas. Los resultados se presentan para el caso en el que hay  $N = 165$  partícu-

las por cada estado hiperfino. Se hace un análisis de las relaciones del virial, las cuales establecen conexiones entre la energía total por partícula como función de las variables que definen al hamiltoniano de interacción entre las partículas y la energía debida al potencial de confinamiento, para diferentes valores de la longitud de dispersión, reportando la verificación numérica de estas relaciones para un potencial de alcance finito en todo el cruce.

En el límite de unitariedad se calcula un parámetro conocido como parámetro de Bertsch, que relaciona la energía total del gas atrapado e interactuante con la energía del gas de Fermi ideal atrapado. Con los resultados obtenidos para diferentes valores del alcance del potencial se obtiene una curva de energía en el límite en que el alcance del potencial tiende a cero, así como también se da una predicción en este límite para el parámetro de Bertsch.

# Summary

In the present work, we study a balanced mixture of  $2N$  fermionic atoms in two different hyperfine states, confined by an isotropic harmonic trap of frequency  $\omega$ , and interacting through a short range potential. This study is at zero temperature. The interacting potential is characterized by two parameters: the intensity and the range of the potential. The effective parameter that defines the interactions in this system is the scattering length, and depending on the value and sign of this parameter, three regions of study can be defined: The BCS region, where the scattering length is negative and fermionic pairs known as Cooper pairs are formed. The BEC region, where the scattering length is positive and there is formation of molecules and the BCS-BEC crossover, in this regime the gas is strongly interacting and there exist a region where the scattering length diverges, this is the so-called unitarity limit.

We use the variational Monte-Carlo method in order to obtain approximate eigenfunctions and eigenenergies of the system. For each region of study, we propose trial many body wave functions that depend on one or two variational parameters. In the BEC region and in the BCS-BEC crossover, the many body trial wave functions basis is an antisymmetrized many-body wave function, constructed as the product of pair functions, these pair functions are solutions of the interacting and trapped two body problem. In this work, we provide an expression for the action of the many-body Hamiltonian on this trial many-body wave function suitable for the Monte-Carlo method and that allow us to make numerical simulations for a large number of particles. For the BCS regime, we used a many body trial wave function based on one body wave functions and corrections associated with the two body correlations.

For a given value of the range of the potential, we obtain the eigenenergies and the corresponding variational parameter that determines the eigenfunctions. Once, the solutions of this problem are known, we analyze the different properties of the Fermi gas, like the one body and two body correlation functions for  $N = 165$  particles for each hyperfine state. We also study the virial relations, which establish connections between the total energy per particle and the energy due to the confined potential, for different values of the

scattering length, we report the numerical verification of these relations for a short range potential along the crossover.

At the unitarity limit we estimate a parameter, known as the Bertsch parameter, that relates the total energy of the trapped and interacting system with the ideal trapped Fermi gas energy. Using the results obtained for different values of the range of the potential, we obtained an energy curve in the limit that the range of the potential tends to zero. In this limit we also provide a prediction for the Bertsch parameter.

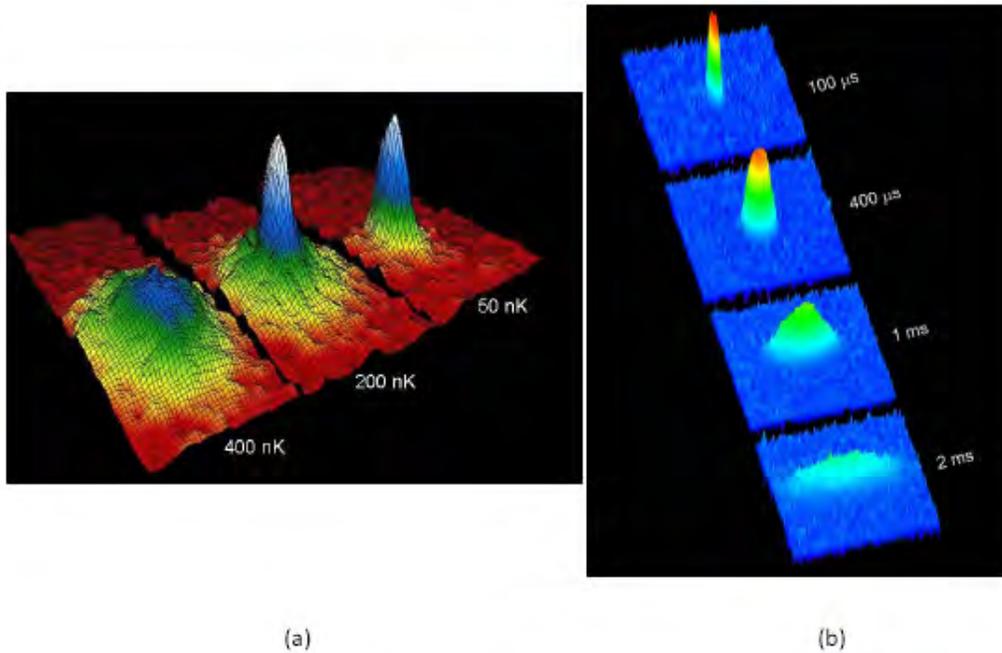
# Introducción

El espín es una propiedad de las partículas subatómicas, es un momento angular intrínseco de magnitud fija, que no tiene análogo clásico. En general, las partículas de la naturaleza las podemos clasificar en dos familias de acuerdo a su espín, si este es un número entero las partículas son bosones y el estado cuántico del sistema está descrito por una función de onda simétrica bajo el intercambio de partículas idénticas. Si el espín es semientero, las partículas son fermiones, y el estado está descrito por una función de onda antisimétrica, y cumplen con el principio de exclusión de Pauli; dos fermiones no pueden tener los mismos números cuánticos, es decir, no pueden estar en el mismo estado cuántico. El comportamiento cuántico de las partículas se manifiesta de forma muy evidente cuando la longitud de onda térmica de de Broglie

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2mk_B T}}$$

es comparable a la distancia promedio entre partículas  $d = (\frac{V}{N})^{1/3}$ . Para  $\lambda_B \sim d$ , los bosones forman el estado conocido como condensado de Bose-Einstein, Figura 1a, el cual fue creado experimentalmente utilizando un gas de átomos de  $^{87}\text{Rb}$ , en el año de 1995 por el grupo de E. Cornell [1], mientras que los fermiones constituyen un gas degenerado de Fermi, Figura 1b, el cual se logró experimentalmente empleando átomos de  $^{40}\text{K}$  en el año de 1999 por el grupo de D. Jin [2]. Este comportamiento cuántico es evidente a bajas temperaturas. Los bosones presentan una ocupación macroscópica del estado base del sistema no interactuante, Figura 2a, mientras que los fermiones, debido al principio de exclusión de Pauli, llenan los niveles de energía hasta la energía de Fermi,  $E_F$ , formando así el mar de Fermi, Figura 2b.

Para poder obtener las bajas temperaturas donde se presenta la condensación de Bose, o el gas degenerado de Fermi, es necesario en la práctica confinar a los átomos. Esto se hace mediante el uso de trampas magnéticas, trampas ópticas o trampas magneto-ópticas [3–6]. Las trampas ópticas requieren de un enfriamiento previo del gas puesto que los átomos neutros interactúan débilmente con los campos electromagnéticos. Ya que se tienen confinados los átomos, el siguiente paso es enfriarlos a una escala que permita entonces

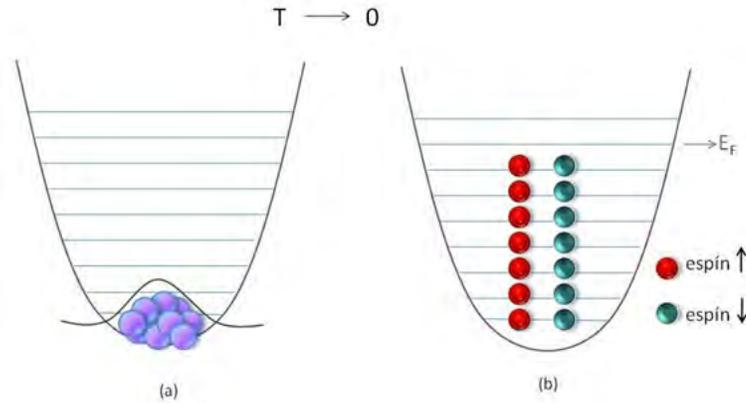


**Figura 1:** En la figura 1(a) se muestra la condensación de Bose-Einstein, mientras que en la Figura 1(b) se muestra el gas degenerado de Fermi. Las imágenes fueron tomadas de [http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/three\\_peaks.html](http://www.colorado.edu/physics/2000/bec/three_peaks.html) y <http://www.light-science.com/duphysics.html> respectivamente.

llevar al gas a un estado de degeneración. Las técnicas de enfriamiento en esta etapa son: el enfriamiento evaporativo [7, 8] y los enfriamientos ópticos, estos últimos incluyen tanto el enfriamiento Doppler como el enfriamiento Sísifo [9–11].

El hecho de poder enfriar a los gases atómicos diluidos se debe a que éstos presentan colisiones binarias. Además de estos sistemas, cabe mencionar que los sistemas de fermiones interactuantes se pueden encontrar en diversas áreas de la física, por ejemplo, en materia condensada están los superconductores o los electrones en metales o en semiconductores, en astrofísica, las estrellas de neutrones o las enanas blancas, o en diferentes sistemas como los protones y neutrones en los núcleos atómicos y el plasma de quark-gluón. Con la realización de los gases de Fermi con interacciones sintonizables y confinamiento controlado, surgen sistemas que permiten estudiar muchos aspectos de los fermiones.

Desde 1999, se han realizado experimentos, donde además de obtener el gas degenerado de Fermi, ha habido una formación de moléculas a partir de pares de fermiones interactuantes altamente correlacionados [2, 12–22] y además se estudian las propiedades del gas. Estos experimentos pudieron realizarse, en primera instancia, gracias a las colisiones que hay entre los átomos ultrafríos donde domina la colisión en onda-*s*, por lo que se utilizan mezclas de fermiones en dos diferentes estados hiperfinos. El parámetro que describe estas



**Figura 2:** Comportamiento de los gases de Bose y Fermi a bajas temperaturas. En la figura 2(a), la mayoría de los bosones se encuentran en el estado base. En la Figura 2(b), se ilustra el caso de espín 1/2; donde los fermiones llenan los niveles de energía hasta el nivel de Fermi,  $E_F$ .

colisiones para las partículas ultrafrías ( $E \rightarrow 0$ ) es la longitud de dispersión,  $\alpha$ , la cual es una medida del radio efectivo de colisión en condiciones de isotropía, como lo es el canal de onda- $s$ . En el caso de fermiones idénticos el principio de exclusión suprime este tipo de colisiones e inhibe la termalización.

Experimentalmente [12–14, 20], una resonancia de Feshbach ofrece la posibilidad de entonar las interacciones en los gases atómicos ultrafríos simplemente aplicando un campo magnético externo. El mecanismo detrás de las resonancias de Feshbach, es la sintonización de la energía de los estados moleculares con la energía de un sistema de pares de átomos y viceversa. Esto lleva a que las interacciones binarias del sistema puedan tener asociadas valores de la longitud de dispersión tanto positivos como negativos. Cuando la longitud de dispersión es positiva,  $\alpha > 0$ , los átomos fermiónicos tienden a formar moléculas cuyo espín total es entero y por lo tanto es un bosón, un gas formado por estas moléculas puede llegar a formar un condensado de Bose-Einstein, BEC<sup>1</sup>. Mientras que cuando la longitud de dispersión es menor que cero,  $\alpha < 0$ , los átomos de Fermi forman pares asociados a correlaciones a distancias comparables a la región de confinamiento. Estos pares están ligados débilmente y se les conoce como pares de Cooper; en esa región se dice que el gas se encuentra en un estado BCS<sup>2</sup>, donde el gas ya ha realizado una transición de fase a la superfluidez. Además, hay una región del gas donde éste es fuertemente interactuante y donde modificando la interacción se puede pasar de un estado molecular, región BEC, a un estado de pares de átomos, región BCS, y viceversa, a esta región se le conoce como *el cruce BCS-BEC* y es central en el estudio de los gases de Fermi; además su descripción teórica detallada es un reto en la actualidad. En esta región, cuando la longitud de dispersión

<sup>1</sup>BEC, por sus siglas en inglés, Bose Einstein Condensation

<sup>2</sup>BCS, por sus siglas en inglés, Bardeen-Cooper-Schrieffer, es la teoría que describe a la superconductividad, basada en la interacción atractiva de los pares de Cooper.

diverge,  $|\alpha| \rightarrow \infty$ , el gas de átomos se vuelve fuertemente interactuante a pesar de que el alcance de la interacción que le dió origen es muy pequeña; a este régimen se le conoce como Unitariedad [23–27]. Este límite es muy importante pues se considera que en esa región el gas tiene un comportamiento universal, donde las propiedades termodinámicas del gas dependen solamente de la densidad y de la temperatura, es decir, las únicas escalas relevantes son el espacio entre partículas y la energía de Fermi, por lo que las propiedades del gas se pueden expresar en términos de ésta y de parámetros universales [25, 26, 28]. Experimentalmente, se han obtenido gases de Fermi con propiedades compatibles con la formación de pares [29, 30], gases moleculares BEC a partir de un gas de Fermi [12–14], y gases donde se realiza el cruce BEC-BCS [12, 18, 21, 31]. En estos sistemas se han medido propiedades termodinámicas como la entropía y el potencial químico [32].

Por otro lado, en el ámbito teórico, ha habido avances gigantescos en la descripción de gases degenerados de Bose, en gran medida por la existencia de una ecuación, conocida como la ecuación de Gross-Pitaevskii que describe razonablemente la dinámica del condensado. Esta ecuación no lineal, utiliza como parámetro de orden a la función de onda  $\Psi$ . Con ella se han descrito diversas propiedades del condensado incluidas: la formación de vórtices [33], el comportamiento en redes ópticas [34], las excitaciones colectivas [35], las propiedades de coherencia [36], y el fenómeno de decoherencia [37] por mencionar algunos.

En el caso del gas de Fermi, no existe análogo preciso de la ecuación de Gross-Pitaevskii. Además, estos sistemas son extremadamente ricos, puesto que como se mencionó con anterioridad, la interacción entre sus componentes permite observar diferentes regiones dependiendo si la interacción entre partículas es fuerte o es débil. Por ejemplo, para la región BCS, existen trabajos [38] donde se hace un símil detallado de los gases atómicos fermiónicos con la descripción de Bardeen, Cooper y Schrieffer, se caracteriza el valor de la brecha de energía [39, 40] así como la temperatura de transición [41]. En el caso de la región BEC, donde se considera que el gas ya es un gas molecular, se ha encontrado a partir del estudio del sistema de cuatro partículas, el valor de la longitud de dispersión molecular efectiva  $\alpha_d$  entre dímeros en términos de la longitud de dispersión entre átomos  $\alpha_d \sim 0.6\alpha$  [42]. Para la región del cruce, actualmente se está trabajando en la búsqueda de una teoría general que la describa tanto en sus aspectos mecánicos como termodinámicos. Dentro de este último rubro, las descripciones que se han realizado en primera instancia se han basado en el estudio del gas de Fermi confinado pero no interactuante utilizando diferentes aproximaciones como: la aproximación de la densidad local (LDA) [43], la teoría de las funcionales de la densidad junto con la aproximación de Thomas Fermi [44], la aproximación de la densidad local junto con el método de Hartree-Fock para diferentes potenciales de confinamiento [45]. También hay estudios que utilizan el método variacional [46, 47]. En estos trabajos se han encontrado expresiones para propiedades termodinámicas como la entropía, y el potencial químico; en ocasiones se trabaja únicamente en la región de unitariedad [48]. Posteriormente, el estudio del gas de Fermi se extendió considerando que las partículas del gas interactúan entre sí, además de que estaban confinadas y la temperatura era finita, estos trabajos utilizan por lo general aproximaciones como la de

densidad local [49] o la de Thomas Fermi [50].

Por otro lado, en el caso de temperatura cero, todas las propiedades del sistema están determinadas por la función de onda del estado base. Los cálculos precedentes para obtener la función de onda y hacer un estudio del cruce empezaron aproximadamente en el año de 2003, con los trabajos de Carlson, Pandharipande *et al* [51, 52] que consideraron un gas homogéneo e interactuante, y la función de onda utilizada era una función de Jastrow-Slater, la cual describía de forma adecuada al sistema para la región BCS; dentro del estudio del gas homogéneo otros trabajos realizados por Giorgini *et al* [53], consideraban dos tipos de funciones de onda, una era la función de Jastrow-Slater y la otra una función antisimetrizada de pares de partículas. A partir de 2004, surgieron una cantidad enorme de trabajos, donde se estudiaba no sólo al gas homogéneo [54] sino también al gas de fermiones interactuante y confinado [46, 50, 55–59]; en estos trabajos la descripción del gas se hace utilizando métodos numéricos, y considerando un cierto número de partículas. Estos cálculos han permitido obtener para este sistema, una ecuación de estado para el gas homogéneo en el cruce [53, 60], en unitariedad [61, 62] e inspeccionar una ecuación de estado perturbativa para el gas atrapado usando la aproximación de la densidad local [63], así como obtener una ecuación de estado fenomenológica [64].

Entre los métodos aproximados que se utilizan para estudiar el cruce BCS-BEC en los gases ultrafríos se encuentran la teoría de la densidad local, la aproximación de Thomas-Fermi, la aproximación de muchos cuerpos autoconsistente [24] y la teoría de campo efectivo [65]. Mientras que, los esquemas computacionales ofrecen nuevas alternativas para conocer y caracterizar las propiedades del estado base del sistema, dentro de éstos, el método Monte-Carlo es una de las herramientas más utilizadas pues da resultados confiables que describen al sistema tanto en el caso interactuante y homogéneo [51–53, 62, 66–71] como en presencia de confinamiento [28, 56–58, 72, 73]. Dentro de los métodos Monte-Carlo, las técnicas más utilizadas son el método Variacional Monte-Carlo, (VMC), el método Monte-Carlo de Funciones de Green, GFMC, el método Monte-Carlo de Funciones de Green de Nodo Fijo, FN-GFMC y el método Monte-Carlo Difusivo de Nodo Fijo, FN-DMC. Todas estas técnicas permiten encontrar las energías y eigenfunciones del sistema, pero tienen una limitante, la cual es el número total de partículas que se pueden calcular, pues en la literatura citada anteriormente generalmente se manejan desde dos hasta 66 partículas, y en pocos casos hasta 90 partículas. Además, cuando se escoge el método numérico se debe considerar que el sistema de estudio son fermiones y por lo tanto la función de onda debe ser antisimétrica ante el intercambio de partículas, en el caso de método GFMC se tiene un problema de signo, el cual se resuelve al utilizar el método Monte-Carlo de Funciones de Green de nodo fijo pues éste impide el cruce de la superficie nodal en las funciones de onda antisimétricas. En el caso del método Monte-Carlo variacional, se hace un muestreo del cuadrado de las funciones de onda por lo que no se tiene el problema del signo. Al estudiar este problema nosotros utilizaremos este método.

Ya que se ha dado un panorama general del problema de estudio, y de los métodos

que se utilizan y que han dado resultados sobre el sistema, cabe mencionar que el sistema permite conocer algunas de sus propiedades, una de éstas es un problema actual y es el cálculo del parámetro universal denotado por  $\beta$ , en el límite de unitariedad. El valor de este parámetro se calcula tanto experimental como teóricamente. Los valores teóricos van desde  $-0.75$  hasta  $-0.33$  [24, 51–53, 56–58, 65, 74], mientras que los valores experimentales varían desde  $\beta = -0.26$  hasta  $-0.68$  [17, 18, 20, 21, 23, 32, 75, 76]. En este trabajo, una vez que se obtienen las eigenfunciones y eigenenergías del sistema, se determinan algunas propiedades del gas de Fermi.

En la presente tesis, nos centraremos en la obtención de una función de onda que describa el estado base de un gas de Fermi con interacciones binarias asociadas a un potencial central de corto alcance en la región del cruce BCS-BEC, aunque daremos resultados en todas las regiones. Utilizaremos métodos numéricos. Incorporaremos las ideas planteadas en los trabajos de Eagles [77], donde da una extensión de la teoría BCS proponiendo funciones de onda de pares de partículas y los trabajos de Leggett [78] que incorpora las ideas de Eagles para la región molecular. Con ello propondremos funciones de onda prueba, que permitan hacer una implementación eficiente del método Monte-Carlo Variacional para calcular de forma óptima el valor medio del hamiltoniano de un sistema de  $2N$  fermiones, obteniendo así las eigenfunciones y eigenenergías del sistema. Esta descripción se realiza a temperatura cero, considerando tanto la interacción entre pares de fermiones como el potencial de confinamiento. Además con esta metodología se pueden hacer cálculos para un número grande de partículas (hemos considerado hasta 520 partículas). Todo ello sin la aproximación de densidad local. Estudiaremos propiedades del sistema tales como las estimaciones del parámetro  $\beta$ , las correlaciones espaciales entre los átomos y las relaciones del virial.

En general, lo que hacemos para resolver este problema es:

1. Definir el potencial de interacción entre pares de partículas, que sea de corto alcance y que reproduzca en el límite que el alcance del potencial tiende a cero, los efectos del potencial de contacto. Además que sea sintonizable por medio de la longitud de dispersión.
2. Definir el método con el que se abordará el sistema. Como se mencionó, hay muchas formas para tratar un sistema de muchas partículas nosotros decidimos utilizar el método variacional MonteCarlo, encontrando así una cota superior para la energía del sistema.
3. Elegir la forma adecuada de las funciones de onda prueba, debido a que el valor de la longitud de dispersión define la región del gas de Fermi. Para cada región se elige la función de onda que describa propiamente al gas.
4. Hacer un algoritmo eficiente que permita manejar un número grande de partículas y que calcule de forma adecuada el parámetro variacional y la energía del sistema.

5. Hacer las simulaciones necesarias para encontrar los valores de los parámetros variables y la energía mínima para cada valor de la longitud de dispersión, dado un alcance del potencial.
6. Una vez que se tiene las eigenfunciones y eigenenergías del sistema, estudiar las propiedades de este gas.

A continuación se desglosa brevemente la organización de la presente tesis.

Debido a que las interacciones entre partículas son muy importantes en los gases ultrafríos, en el primer Capítulo, se presenta una breve revisión sobre los conceptos principales de la teoría de la dispersión, este estudio se muestra tanto en el sistema de un solo canal como en el caso multicanal. En el caso de la dispersión de un solo canal se hace énfasis a los parámetros que describen la dispersión a bajas temperaturas, en este caso la longitud de dispersión. Así mismo se describe el método de fase variable, el cual da una expresión para los corrimientos de fase en términos de una ecuación no lineal de primer grado, para cualquier tipo de potencial de interacción, que se puede resolver de forma numérica, y una vez conocidos los corrimientos de fase se puede calcular la longitud de dispersión que caracteriza al sistema. En el caso de la dispersión del sistema multicanal se describe brevemente este tipo de dispersión la cual da lugar a las resonancias de Feshbach; este mecanismo es el que permitió obtener de forma experimental el cruce BCS-BEC.

En el Capítulo Dos se describen los principales métodos experimentales que se desarrollaron para poder realizar experimentalmente los gases de Fermi, lo cual incluye tanto los métodos de confinamiento como los métodos de enfriamiento. En este capítulo también se hace una breve descripción de los principales experimentos que han marcado la física de los gases de Fermi.

Aunque en la presente tesis, los cálculos que se presentan son a temperatura cero en el Capítulo Tres se describe la termodinámica convencional del gas de Fermi ideal, pues no se consideran las interacciones entre las partículas, pero sí se estudia este gas con dos potenciales de confinamiento, el primero es una caja de volumen  $V$  y el segundo es un potencial armónico. Se describen las principales propiedades de estos gases, como lo son, la densidad de estados, el potencial químico y el calor específico, estos últimos se muestran en los límites de altas y bajas temperaturas, también se describe una comparación entre estos gases debido a que el potencial de confinamiento cambia.

Dado que uno de los objetivos de la presente tesis es poder conocer las eigenfunciones y eigenenergías de un gas de Fermi interactuante y confinado, el cual es un sistema de muchas partículas, un paso natural previo a esto es conocer tanto las eigenfunciones como eigenenergías del sistema cuando sólo se tienen dos partículas. Por este motivo, en el Capítulo Cuatro se describe el sistema de dos partículas interactuantes y confinadas por

medio de un potencial armónico isotrópico. El potencial de interacción es un potencial de corto alcance exponencial y es el mismo potencial que se utiliza para el sistema de muchas partículas. En este capítulo, también se hace una breve descripción de los diferentes potenciales efectivos que puede modelar la interacción para un gas de Fermi, siendo la interacción más común la dada por el potencial de contacto, por lo que se muestra el estudio de dos partículas confinadas que interactúan por medio de dicho potencial. Se hace una comparación de los resultados obtenidos mediante el potencial de corto alcance y el dado por el potencial de contacto mostrando que en el límite donde el alcance del potencial tiende a cero se obtienen los resultados del potencial de contacto, lo cual permite concluir que el potencial de interacción exponencial de corto alcance que escogemos es un potencial adecuado para la descripción del problema en cuestión además que permite tener una expresión analítica de la longitud de dispersión, que nos permitirá caracterizar las diferentes regiones de estudio.

Debido a que estamos interesados en el estudio del gas de Fermi en el canal de ondas, consideramos una mezcla de fermiones en dos diferentes estados hiperfinos, con igual número de partículas de cada especie, las características de este gas así como el modelo y el método que empleamos para estudiarlo, el cual es el método Monte-Carlo Variacional, se presentan en el Capítulo Cinco. La longitud de dispersión es el parámetro que determina las interacciones de este gas y además dependiendo de su valor y del signo se determinan las diferentes regiones de estudio las cuales son: la región BCS, la región BEC, el cruce BCS-BEC; en este capítulo se hace una descripción de las características del gas en cada una de estas regiones, el conocimiento de estas características conduce a que la función de onda prueba incluya el comportamiento adecuado del gas dependiendo de la región a estudiar. En cada región se describen las funciones de onda prueba que utilizamos así como la forma en que se calcula el valor medio del hamiltoniano de este sistema.

En el Capítulo Seis se muestran los resultados numéricos obtenidos para este sistema, es decir, se presentan las curvas de energía y los parámetros variacionales para cada región, para un valor del alcance del potencial. Una vez que se conocen las eigenfunciones y eigenenergías se tiene determinado el gas para un valor dado de la longitud de dispersión, por lo cual se pueden estudiar propiedades de ese sistema como los son las funciones de correlación de una y dos partículas y el teorema del virial para gases ultrafríos. En este Capítulo se muestran los resultados obtenidos para estas propiedades y en el caso del teorema del Virial un análisis en el caso que el potencial de interacción es el potencial exponencial de corto alcance.

Por último, se presentan las Conclusiones de esta tesis y en los Apéndices se incluyen los detalles numéricos o las herramientas necesarias para la realización de este trabajo.

# CAPÍTULO 1

## Teoría de la dispersión.

Las interacciones entre las partículas juegan un papel importante en la física de átomos ultrafríos, por lo cual se deben conocer los aspectos generales, así como los parámetros que describen la colisión entre dos partículas. En el presente capítulo se describirá la dispersión entre partículas. Primero se presentarán los conceptos generales de las colisiones entre dos partículas, posteriormente se describirán la dispersión a bajas energías y los parámetros que la describen, los cuales se utilizarán en la descripción de los átomos ultrafríos. En las primeras secciones se describirá la dispersión en un solo canal, enfocada en el método de ondas parciales y la aproximación de fase variable, los cuales permiten obtener una expresión de la longitud de dispersión. Posteriormente se estudiará la dispersión de dos canales para onda-*s* y las resonancias de Feshbach las cuales surgen cuando la colisión es en un sistema multicanal, en este caso el estudio de dichas resonancias es en un sistema de dos canales.

### 1.1 Dispersión de un solo canal.

#### 1.1.1 Descripción y conceptos fundamentales.

En este trabajo se estudian átomos ultrafríos, los cuales son gases diluidos, en los cuales las colisiones que se presentan son predominantemente las colisiones binarias. Consideraremos la dispersión de dos partículas (que en el contexto de la tesis son átomos) de masa  $m$  respectivamente, con coordenadas  $\vec{r}_1$  y  $\vec{r}_2$ , que interactúan por medio de un potencial  $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ , el cual depende sólo de la distancia entre las partículas [79,80]. El movimiento de los átomos se puede separar en las coordenadas del centro de masa y relativa, descritas por la funciones de onda  $\Phi(\vec{R})$  y  $\psi(\vec{r})$  respectivamente. Donde  $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$  y  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ . La ecuación de Schrödinger para la función de onda de la coordenada relativa  $\psi(\vec{r})$  con energía  $E$  es:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}); \quad (1.1)$$

donde  $\mu$  es la masa reducida del sistema. Los valores de la energía de la ecuación anterior pueden ser positivos o negativos. Dependiendo de donde esté el cero del potencial de interacción, los eigenvalores negativos corresponden a estados ligados o estados moleculares. Para estudiar la dispersión átomo-átomo, se consideran soluciones con energía positivas  $E = 2\epsilon_k$ , donde  $\epsilon_k = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  es la energía de un átomo libre con momento,  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

En este trabajo consideraremos potenciales de corto alcance  $V(r)$ , los cuales cumplen:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^2 V(r) = 0, \quad (1.2)$$

es decir, a grandes distancias tienden a cero más rápido que un potencial de la forma  $r^{-2}$ .

Para distancias grandes  $r \rightarrow \infty$ , la función de onda solución de la ecuación (1.1), que cumple las condiciones de frontera adecuadas en el comportamiento asintótico es:

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \rightarrow A \left( e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right); \quad r \rightarrow \infty; \quad (1.3)$$

donde A es una constante. La función de onda descrita por la ecuación (1.3), es una superposición de una onda plana entrante con vector de onda  $\vec{k}$ , y una función de onda esférica saliente ( $\frac{e^{ikr}}{r}$ ), modulada por una función  $f$  que depende de los ángulos  $\theta$  y  $\phi$ , la cual es conocida como la *amplitud de dispersión*. La amplitud de dispersión contiene toda la información física sobre el proceso de la dispersión, y se utiliza para calcular la sección eficaz como se mostrará más adelante.

La dispersión entre átomos alcalinos se estudia considerando que los átomos interactúan por medio de un potencial central. La ecuación de Schrödinger para la coordenada relativa, Ec. (1.1) tiene simetría esférica, por lo que la función de onda se puede escribir como:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi); \quad (1.4)$$

donde  $u(r) = rR_{\ell}(r)$ ,  $R_{\ell}(r)$  es la solución radial y  $Y_{\ell,m}$  son los armónicos esféricos, que describen la parte angular. Utilizando la función de onda, Ec. (1.4), la ecuación de Schrödinger, Ec. (1.1) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) - \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right] u(r) = 0. \quad (1.5)$$

La energía de la colisión es  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ . Las dos partículas sienten la interacción de un potencial efectivo,  $V_{eff}$ , el cual es la suma del potencial de interacción y el potencial centrífugo:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}, \quad (1.6)$$

$\ell$  es el momento angular entre las partículas. Cada valor del momento angular  $\ell$ , es solución de la ecuación (1.5) y todas estas soluciones contribuyen a la dispersión; por lo que la función de onda es una suma de todos los posibles valores del momento angular  $\ell$  y de la proyección del momento angular  $m$ , es decir, es una expansión de las funciones angular y radial ( $R_{\ell m}(k, r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ ):

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} R_{\ell m}(\vec{r}) Y_{\ell m}(\theta, \phi). \quad (1.7)$$

El método de ondas parciales consiste en desarrollar la función de onda de dispersión, en una suma infinita de ondas parciales del momento angular, Ec. (1.7), etiquetados por el número cuántico del momento angular orbital  $\ell$ ; cada valor de  $\ell$  contribuye a la dispersión. Se conoce como dispersión en onda- $s$  cuando  $\ell = 0$ , en onda- $p$  cuando  $\ell = 1$ , onda- $d$  cuando  $\ell = 2$ , y así sucesivamente. Esta expansión permite obtener una expresión conveniente de la amplitud de dispersión. La amplitud de dispersión para cada valor de  $\ell$  se calcula por separado, cada una de éstas se conoce como amplitud de dispersión de onda parcial; siendo la amplitud de dispersión total la suma de todas las amplitudes de ondas parciales.

La ecuación (1.5), se puede escribir como:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \tilde{V}(r) \right] u_{\ell}(r) = 0. \quad (1.8)$$

donde  $\tilde{V}(r) = 2mV/\hbar^2$ .

La función de onda, solución de la Ec. (1.8), debe cumplir las condiciones a la frontera apropiadas, tanto en el origen como a grandes distancias (comportamiento asintótico). En este límite, para distancias mucho más grandes que el alcance del potencial  $r_0^1$ ,  $r \gg r_0$ , la ecuación de Schrödinger corresponde a la ecuación de una partícula libre cuya solución es:

$$u_{\ell}(k, r) = kr [C_{\ell}^{(1)}(k) j_{\ell}(kr) + C_{\ell}^{(2)}(k) n_{\ell}(kr)], \quad r \gg r_0; \quad (1.9)$$

donde  $j_{\ell}(kr)$  es la función esférica de Bessel y  $n_{\ell}(kr)$  es la función de Neumann. Utilizando las siguientes expresiones para las funciones  $j_{\ell}$  y  $n_{\ell}$

$$j_{\ell}(x) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \text{sen}(x - \frac{1}{2}\ell\pi), \quad y \quad (1.10)$$

---

<sup>1</sup>El alcance del potencial,  $r_0$ , es la distancia a partir de la cual el efecto del potencial de dispersión puede ser despreciado. Por ejemplo, en el caso del potencial de Yukawa  $V(R) = V_0 r^{-1} e^{-\alpha r}$ , donde  $V_0$  es constante. El alcance en este potencial es  $r_0 = \alpha^{-1}$ .

$$n_\ell(x) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{1}{2}\ell\pi\right); \quad (1.11)$$

se obtiene la condición de frontera en el comportamiento asintótico para la función  $u_\ell$ :

$$u_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_\ell(k) \text{sen}\left[kr - \frac{1}{2}\ell\pi + \delta_\ell(k)\right]; \quad (1.12)$$

donde:  $A_\ell(k) = \{[C_\ell^{(1)}(k)]^2 + C_\ell^{(2)}(k)^2\}^{1/2}$  y;

$$\tan \delta_\ell(k) = -\frac{C_\ell^{(2)}(k)}{C_\ell^{(1)}(k)}. \quad (1.13)$$

Siendo la función radial  $R_\ell(k, r)$ :

$$R_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \mathcal{A}_\ell(k) [j_\ell(kr) - \tan \delta_\ell(k) n_\ell(kr)], \quad (1.14)$$

donde  $\mathcal{A}(k)$  es una constante.

A los parámetros  $\delta_\ell$  se les conoce como *corrimientos de fase*, y en éstos se ve reflejada la influencia de la interacción, pues indican que la función de onda es proporcional a la solución libre salvo que la fase de sus oscilaciones presenta un corrimiento dado por una cantidad  $\delta_\ell$ , es decir, el efecto de la interacción es producir un corrimiento de fase  $\delta_\ell$  en la onda esférica saliente. En ausencia de interacción, no hay un término explícito de los corrimientos de fase, pues en ese caso  $\delta_\ell = 0$ .

Utilizando las condiciones a la frontera Ec. (1.3) y Ec. (1.12), se obtiene la expresión para la amplitud de dispersión

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) [e^{2i\delta_\ell} - 1] P_\ell(\cos \theta). \quad (1.15)$$

La cual se puede escribir como:

$$f(k, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) a_\ell(k) P_\ell(\cos \theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell(k) P_\ell(\cos \theta); \quad (1.16)$$

donde

$$a_\ell(k) = \frac{1}{2ik} [e^{2i\delta_\ell} - 1] = \frac{1}{2ik} [S_\ell(k) - 1] = \frac{1}{k} e^{i\delta_\ell} \text{sen} \delta_\ell(k). \quad (1.17)$$

A las amplitudes  $a_\ell(k)$  se les conoce como *amplitudes de ondas parciales*, así que si se conocen corrimientos de fase ( $\delta_\ell$ ) se puede calcular la amplitud de dispersión.  $S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)}$  es la matriz de dispersión o matriz- $S$ .

Los corrimientos de fase llevan la información sobre la interacción, y se relacionan con el potencial de interacción  $V$  por medio de la siguiente representación integral:

$$\tan \delta_\ell = -k \int_0^\infty j_\ell(kr)V(r)R_\ell(r)r^2 dr. \quad (1.18)$$

De la ecuación anterior se observa que si consideramos que el potencial  $V(r)$  depende de un parámetro que se denotará como  $s$ , es decir,  $V = V(r, s)$ , entonces la ecuación anterior se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{d}{ds} \delta_\ell = -k \int_0^\infty [u_\ell(s, r)]^2 \frac{\partial}{\partial s} V(s, r) dr \quad (1.19)$$

Si el potencial de interacción es repulsivo, los corrimientos de fase son negativos  $\delta_\ell < 0$ . Cualquier incremento en el potencial conlleva a un pequeño corrimiento de fase que tendrá un valor más negativo. Mientras que, si el potencial es atractivo, el corrimiento de fase crece y es positivo  $\delta_\ell > 0$ . Si el potencial es muy atractivo se incrementan los  $\delta_\ell$ . En el caso de la partícula libre, la función de onda asintótica tiene nodos en:

$$r = \frac{1}{k}(n\pi + \frac{1}{2}\ell\pi) \quad (1.20)$$

Mientras que, en presencia de un potencial de interacción los nodos se encuentran en:

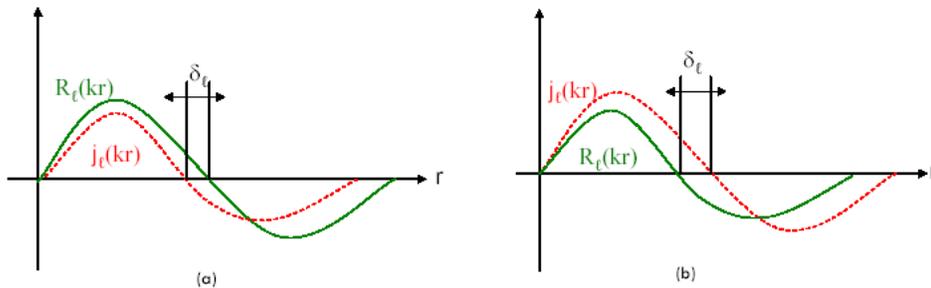
$$r = \frac{1}{k}(n\pi + \frac{1}{2}\ell\pi - \delta_\ell). \quad (1.21)$$

Para potenciales repulsivos se espera que la función radial  $u_\ell(k, r)$  se aleje de la función radial libre; por lo que los ceros dados por la Ec. (1.21) están desplazados hacia la izquierda respecto de los ceros de la solución radial libre, lo que lleva a que  $\delta_\ell < 0$  (Ver Figura 1.1(a)). Mientras que para un potencial atractivo la función radial  $u_\ell(k, r)$  se aproxima a la función radial libre, los nodos de la función de onda están “corridos” hacia la izquierda, siendo los corrimientos de fase positivo  $\delta_\ell > 0$  (Ver figura 1.1(b)). Cuando  $\delta_\ell(k) = n\pi$  para algún valor en particular de  $\ell$  y  $k$  no hay dispersión asociada a esa onda parcial con energía  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ .

Hasta el momento se ha descrito como calcular la amplitud de dispersión y los corrimientos de fase, pero además es importante conocer una expresión para la sección eficaz, la cual se relaciona con la amplitud de dispersión, y es la cantidad generalmente reportada en los experimentos de colisiones. La sección eficaz es la razón entre el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo, por unidad de área, respecto al flujo de partículas incidentes. La sección eficaz diferencial se define como:

$$\sigma(\Omega)d\Omega = \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = |f(\Omega)|^2 d\Omega. \quad (1.22)$$

e indica cual es el número de partículas emitidas por unidad de tiempo y unidad de flujo incidente dentro de un ángulo sólido  $d\Omega$  en la dirección de  $\Omega(\theta, \phi)$ . A partir de la amplitud de dispersión Ec. (1.15) se calcula la sección transversal diferencial:



**Figura 1.1:** Corrimientos de fase en la función libre  $l_\ell$  respecto a la función  $R_\ell$ , debido a un potencial de interacción. (a) Para un potencial repulsivo. (b) Para un potencial atractivo.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{\infty} (2\ell + 1)2\ell' + 1) e^{i[\delta_\ell(k) - \delta_{\ell'}(k)]} \text{sen} \delta_\ell(k) \text{sen} \delta_{\ell'}(k) P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta); \quad (1.23)$$

siendo la sección eficaz total:

$$\sigma_{tot}(k) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \theta) \text{sen} \theta \, d\theta = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell(k) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell(k). \quad (1.24)$$

A los términos  $\sigma_\ell(k)$  se les conoce como *sección transversal de ondas parciales*, y están dadas por:

$$\sigma_\ell(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \text{sen}^2 \delta_\ell(k). \quad (1.25)$$

La contribución máxima de cada onda parcial a la sección eficaz total es:

$$\sigma_\ell^{max}(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1), \quad (1.26)$$

es decir, cuando  $\text{sen}^2 \delta_\ell(k) = 1$ , por lo que los corrimientos de fase toman los siguientes valores:

$$\delta_\ell(k) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.27)$$

Cuando  $\delta_\ell(k) = n\pi$  no hay contribución a la sección eficaz total debido a las ondas parciales.

Una de las propiedades de la amplitud de dispersión, es el teorema óptico, o relación de Bohr-Peierls-Placzek; la cual es una consecuencia de la conservación del flujo de corriente y relaciona la sección eficaz con la amplitud de dispersión:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(\theta = 0) \quad (1.28)$$

### 1.1.2 Dispersión a bajas energías.

Los efectos de la interacción en un gas ultrafrío se pueden modelar por medio de unos pocos parámetros que caracterizan la dispersión de dos partículas a bajas energías, que en el contexto que se considera en esta tesis corresponde a bajas temperaturas. El régimen de bajas energías es aquél en donde el alcance del potencial  $r_0$  del potencial interatómico es mucho menor que el momento  $k$  de las partículas  $r_0 \ll 1/k$  [46]. En este régimen se utiliza el método de ondas parciales, pues sólo un número pequeño de ondas parciales contribuyen a la dispersión, aquellas que cumplen la siguiente relación:  $\ell \leq kr_0$ .

En el límite de bajas energías,  $kr_0 < 1$ , solo se calcularán un número pequeño de corrimientos de fase para obtener la amplitud de dispersión. Como se mencionó anteriormente el potencial efectivo es  $V_{eff} = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ ; el término centrífugo se vuelve más importante conforme  $\ell$  aumenta. Si la energía con la que colisionan los átomos es menor que la altura de la barrera centrífuga, entonces la colisión es altamente despreciable. Por lo que a bajas energías, las colisiones con  $\ell > 0$  se anulan. Mientras que cuando  $\ell$  crece, las partículas incidentes necesitan mayor energía cinética para superar la repulsión del término centrífugo y estar en la región del potencial; si la colisión es a bajas energías, sólo unas pocas ondas parciales influirán en la dispersión de forma importante. Por lo que la mayor contribución a la dispersión proviene de aquellos estados cuya componente del momento angular es  $\ell = 0$ , es decir, los estados de onda- $s$ .

En el caso de dispersión de onda- $s$ , debida a un potencial de interacción de corto alcance, donde para  $r > r_0$  el potencial se hace cero, se debe cumplir las condiciones a la frontera en  $r = r_0$ , las cuales implican que tanto la función  $R_\ell$  como la derivada  $dR_\ell/dr$  sean continuas en  $r = r_0$ . Lo que es equivalente a pedir que la derivada logarítmica, ya sea de  $R_\ell$  o de  $u_\ell$  sea continua en  $r = r_0$ . Por lo que se define a  $\gamma_\ell(k)$  la derivada logarítmica de  $R_\ell$  evaluada en  $r_0$  de la siguiente manera:

$$\gamma_\ell(k) = \left[ \frac{1}{R_\ell} \frac{dR_\ell}{dr} \right]_{r=r_0}, \quad (1.29)$$

y considerando  $R_\ell$  dada por la expresión de la Ec. (1.14) se obtiene que:

$$\gamma_\ell(k) = \frac{k \left[ \frac{d}{dr} j_\ell(kr_0) - \tan \delta_\ell(k) \frac{d}{dr} n_\ell(kr_0) \right]}{j_\ell(kr_0) - \tan \delta_\ell(k) n_\ell(kr_0)} \quad (1.30)$$

Despejando  $\tan \delta_\ell(k)$  de la expresión anterior se obtiene la siguiente expresión para los corrimientos de fase:

$$\tan \delta(k) = \frac{k \frac{d}{dr} j_\ell(kr_0) - \gamma_\ell(k) j_\ell(kr_0)}{k \frac{d}{dr} n_\ell(kr_0) - \gamma_\ell(kr_0)}. \quad (1.31)$$

Utilizando la representación en series de las funciones  $j_\ell(kr_0)$  y de  $n_\ell(kr_0)$  se obtiene la siguiente expresión para los corrimientos de fase:

$$\tan \delta_\ell \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{(kr_0)^{2\ell+1}}{D_\ell} \frac{\ell - r_0 \hat{\gamma}_\ell}{\ell + 1 + r_0 \hat{\gamma}_\ell}, \quad (1.32)$$

donde

$$D_\ell = (2\ell + 1)!!(2\ell - 1)!!, \quad \ell > 0; \quad D_0 = 1; \quad (1.33)$$

$$y \quad \hat{\gamma}_\ell = \lim_{k \rightarrow 0} \gamma_\ell(k), \quad \gamma_\ell = \left[ \frac{1}{R_\ell} \left( \frac{dR_\ell}{dr} \right) \right]_{r=r_0} \quad (1.34)$$

Supongamos que la ecuación Ec. (1.32) no tiene polos ( $a\hat{\gamma}_\ell \neq -(\ell + 1)$ ). Notamos que *los corrimientos de fase tienden a cero (módulo  $\pi$ ) con la dependencia en  $k$  como  $k^{2\ell+1}$* . En el caso de onda-s, los corrimientos de fase onda-s  $\delta_0(k)$  dependen en forma lineal con  $k$ . Los elementos de la matriz-S están dados por:

$$S_\ell(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} 1 + 2i\bar{c}_\ell k^{2\ell+1}. \quad (1.35)$$

Las constantes  $\bar{c}_\ell$  son números reales. En el caso de bajas energías ( $k \rightarrow 0$ ), las amplitudes de onda parciales, Ec. (1.17), son proporcionales a  $\frac{\delta_\ell}{k}$  y tienden al siguiente valor:

$$a_\ell(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \bar{c}_\ell k^{2\ell}. \quad (1.36)$$

Se define la *longitud de dispersión* ( $\alpha$ ) como:

$$\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}. \quad (1.37)$$

Cuando  $k \rightarrow 0$ , la amplitud de onda parcial de onda-s está dada por:

$$\lim_{k \rightarrow 0} a_0(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\text{sen} \delta_0(k)}{k} = -\alpha; \quad (1.38)$$

y la amplitud de dispersión se reduce a:

$$f \xrightarrow{k \rightarrow 0} -\alpha. \quad (1.39)$$

La ecuación para la función libre  $u_0$ , Ec. (1.12), se puede escribir en términos de la longitud de dispersión ( $\alpha$ ) de la siguiente forma:

$$u_0(r) \xrightarrow{k \rightarrow 0} A[r - \alpha]. \quad (1.40)$$

Lo cual lleva a la interpretación geométrica de la longitud de dispersión, pues es la intersección de la recta tangente a  $u_0(r)$  con el eje  $r$ . Para poder ejemplificar la relación entre el potencial de interacción y la longitud de dispersión se considerarán los siguientes casos:

1. Para un potencial repulsivo  $V > 0$  la curvatura de la solución libre  $u_0$  se aleja siempre del eje  $r$ , y por lo tanto la longitud de dispersión es positiva ( $\alpha > 0$ ). Figura 1.2(a).
2. Mientras que para un potencial atractivo  $V < 0$ , cuya amplitud no es muy intensa, en el canal en onda- $s$ , se dan los siguientes casos dependiendo de cómo es el potencial (Ver Figura 1.2):
  - (a) Cuando el potencial  $V$  es incapaz de producir un estado ligado, la longitud de dispersión es negativa ( $\alpha < 0$ ) Figura 1.2(b).
  - (b) Cuando el potencial  $V$  puede producir un estado virtual, conocido como resonancia cero o resonancia de energía cero, la longitud de dispersión diverge  $\alpha \rightarrow \infty$  Figura 1.2(c)
  - (c) Cuando el potencial  $V$  es capaz de producir al menos un estado ligado, la longitud de dispersión es positiva  $\alpha > 0$  Figura 1.2(d).

Estas consideraciones pueden generalizarse en el caso que la intensidad del potencial aumente dando origen a más de un estado ligado.

Para tener una descripción completa de las colisiones de dos átomos ultrafríos se requiere hacer un análisis de la dispersión en un sistema multicanal, donde se incorpora el desdoblamiento de los niveles hiperfinos. Para poder describir el caso de las resonancias de Feshbach se necesita por lo menos un sistema de dos canales, como se mencionará en la última sección del presente capítulo.

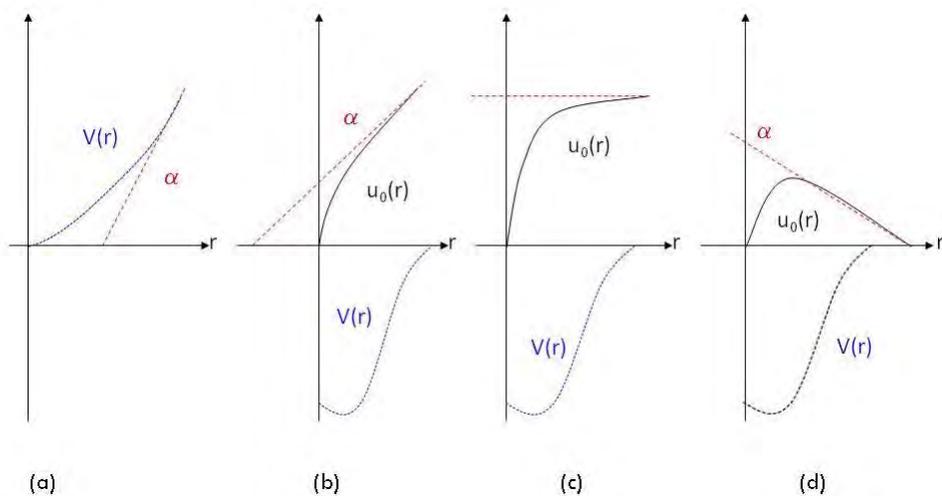
Como se mencionó anteriormente es importante conocer la expresión de la sección transversal total. En el caso de onda- $s$ , la contribución para las secciones transversales parciales  $\sigma_\ell$ , tiende a una constante diferente de cero, mientras que para las demás secciones transversales parciales  $\sigma_\ell$  ( $\ell \geq 1$ ) decaen como  $k^{4\ell}$ . Por lo tanto la dispersión es isotrópica a muy bajas energías y  $\sigma_{tot} = \sigma_0$ ; y la sección transversal diferencial de dispersión se reduce a:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \xrightarrow{k \rightarrow 0} \alpha^2, \quad (1.41)$$

y

$$\sigma_{tot} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi\alpha^2. \quad (1.42)$$

La ecuación anterior tiene un significado geométrico: cada átomo ofrece una superficie de dispersión efectiva de área  $4\pi\alpha^2$ .



**Figura 1.2:** Comportamiento geométrico de la longitud de dispersión. La curva de puntos representa el potencial de interacción  $V$ . La curva sólida corresponde a la función radial libre  $u_0(r)$  y la recta en segmentos representa la tangente a la función libre. (a) Longitud de dispersión para un potencial repulsivo,  $\alpha > 0$ . Para un potencial atractivo  $V < 0$  se tienen los siguientes casos: (b) La longitud de dispersión es negativa  $\alpha < 0$ , (c) Diverge  $|\alpha| \rightarrow \infty$ . (d) La longitud de dispersión es positiva  $\alpha > 0$ .

Por último, se describirá el valor de la sección transversal de dispersión en el caso de resonancia. Para lo cual, se considera que el potencial de interacción entre pares de partículas es atractivo, y que en el espectro de los estados ligados, éste tiene un estado en el canal de onda- $s$ , cuya energía  $\tilde{\epsilon} = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$  es menor que el valor del potencial de interacción evaluado en el alcance del potencial [81]. Se dice que el estado está en la resonancia o cerca de la resonancia cuando la energía de los estados que se dispersan  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  es igual o cercana a la energía  $\tilde{\epsilon}$ . En este caso la expresión de la amplitud de dispersión, en el canal de onda- $s$  es:

$$f = -\frac{1}{\kappa^2 + k^2}, \quad (1.43)$$

mientras que para la sección transversal de dispersión se tiene

$$\sigma = \frac{4\pi}{\kappa^2 + k^2}. \quad (1.44)$$

A bajas energías cuando  $\kappa$  tiende a cero, la cantidad  $\tan \delta_0$  varía como  $k^{-1}$ , por lo que el corrimiento de fase  $\delta_0$  toma el valor de  $1/2\pi$  y entonces los elementos de la matriz- $S$  para el caso de onda- $s$  son:

$$S_0(k) = e^{2i\delta_0(k)} = e^{2i(\frac{1}{2})\pi} = -1 \quad (1.45)$$

y las amplitudes de onda parciales varían como  $a_0 \sim i/k$ .

Además, a partir de la definición de la longitud de dispersión Ec. (1.37), se concluye que en esta región la longitud de dispersión diverge y además que la amplitud de dispersión y la sección transversal de dispersión varían como:

$$f \sim \frac{i}{k}, \quad y \quad (1.46)$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}. \quad (1.47)$$

La ecuación anterior implica que en la región donde la longitud de dispersión diverge, la sección transversal de dispersión varía como el inverso del momento al cuadrado de las partículas que se dispersan, y es una cantidad grande pero finita. Además la amplitud de dispersión varía como el inverso del momento, Ec. (1.46), lo cual implica que es independiente del potencial de interacción, por lo que, generalmente a esta expresión se le conoce como ley universal [46]. El hecho de que en el límite en el que la longitud de dispersión diverge, y tanto la amplitud como la sección transversal de dispersión son independientes del potencial de interacción, se le conoce como límite de unitariedad, la razón por lo que recibe este nombre, parece ser que proviene de que en este límite la sección transversal de dispersión cumple con el teorema óptico; el cual se relaciona con las condiciones de unitariedad para la dispersión [79,81]. Además tanto en la Referencia [82] como en [83] se dice que el límite de unitariedad es aquel donde la amplitud de dispersión tiene su valor límite,  $f = i/k$ , y además el sistema no depende de la interacción. En esta región se cumple  $|\alpha| \gg k^{-1}$ .

De esta descripción sobre la dispersión a bajas energías, concluimos que la longitud de dispersión  $\alpha$  es el parámetro necesario para describir las propiedades de dispersión de los átomos ultrafríos. Diferentes potenciales que modelan la interacción entre dos partículas con el mismo valor de longitud de dispersión tienen las mismas propiedades de dispersión. Por lo que podemos seleccionar el potencial que modele la interacción entre los átomos, de tal forma que se adecúe a los cálculos numéricos que se realicen para modelar el gas de Fermi. En el Capítulo cinco, se describirán los diferentes potenciales efectivos que pueden modelar la interacción de los átomos ultrafríos.

### 1.1.3 Método de fase variable.

En las secciones anteriores se ha descrito las propiedades de dispersión enfocadas a bajas temperaturas. Uno de los parámetros que describen la colisión en ese límite es la longitud de dispersión, en esta sección se describirá un método que permite calcular los corrimientos de fase, y a partir de éstos se puede evaluar dicho parámetro.

Para poder evaluar los corrimientos de fase producidos por un potencial central, usualmente se resuelve la ecuación de Schrödinger, la cual es una ecuación diferencial de segundo orden, pero muchas veces no es fácil resolver o integrar esta ecuación desde el origen hasta

la región asintótica donde el potencial es despreciable, por lo que es más conveniente utilizar un método conocido como método de fase variable o método de fase donde se integra una ecuación no lineal de primer orden, desde el origen hasta la región asintótica, obteniendo así los corrimientos de fase [84]. La ventaja de este método estriba en poder ejecutar cálculos numéricos de manera eficiente. Este método ha sido usado en problemas de dispersión, se desarrolló en un principio para derivar la ecuación para dispersión de onda- $s$ , aunque en la presente sección se muestra el desarrollo para cualquier caso de onda parcial, el enfoque también será en el caso de bajas energías. Este método fue desarrollado por Morse y Allis en 1933.

En el problema de dispersión debido a un potencial esféricamente simétrico, se resuelve la ecuación radial:

$$\frac{d^2 u_\ell(r)}{dr^2} + [k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r)]u_\ell(r) = 0; \quad (1.48)$$

$u_\ell(r)$  es la función de onda radial, y  $V(r)$  es el potencial de interacción el cual es de corto alcance. La función  $u_\ell(r)$  satisface la siguiente ecuación integral:

$$u_\ell(r) = \hat{j}_\ell(kr) - \frac{1}{k} \int_0^r ds [\hat{j}_\ell(kr)\hat{n}_\ell(ks) - \hat{j}_\ell(ks)\hat{n}_\ell(kr)]V(s)u_\ell(s); \quad (1.49)$$

$\hat{j}_\ell$  y  $\hat{n}_\ell$  son las funciones de Ricatti-Bessel:

$$\hat{j}_\ell = \left(\frac{\pi x}{2}\right)^{1/2} J_{\ell+1/2}(x), \quad y \quad \hat{n}_\ell = (-1)^{\ell+1} \left(\frac{\pi x}{2}\right)^{1/2} J_{-(\ell+1/2)}(x). \quad (1.50)$$

Para poder deducir la ecuación de fase, se introducen dos funciones auxiliares, las cuales se definen en términos de la función de onda radial, estas funciones son:

$$s_\ell(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r dr' V(r') \hat{j}_\ell(kr') u_\ell(r'), \quad (1.51)$$

$$c_\ell(r) = 1 - \frac{1}{k} \int_0^r dr' V(r') \hat{n}_\ell(kr') u_\ell(r'), \quad (1.52)$$

Utilizando las definiciones de  $s_\ell(r)$  y  $c_\ell(r)$ , ecuaciones (1.51) y (1.52), y la ecuación integral Ec. (1.49); la función radial  $u_\ell(r)$  es:

$$u_\ell(r) = c_\ell(r)\hat{j}_\ell(kr) - s_\ell(r)\hat{n}_\ell(kr). \quad (1.53)$$

En el regimen asintótico, las funciones  $s_\ell(r)$  y  $c_\ell(r)$  tienen valores definidos, los cuales se denotarán como  $c_\ell(\infty)$  y  $s_\ell(\infty)$ . Debido a que el potencial de interacción tiende a cero, y las funciones  $\hat{j}_\ell$  y  $\hat{n}_\ell$  tienen expresiones definidas, en este límite, la función  $u_\ell(r)$  es:

$$u_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} c_\ell(\infty) \text{sen} \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} \right) + s_\ell(\infty) \text{cos} \left( kr - \ell \frac{\pi}{2} \right). \quad (1.54)$$

En la ecuación (1.12), también se muestra el comportamiento asintótico de la función radial  $u(r)$ . Comparando las ecuaciones (1.54) y (1.12) se obtiene:

$$\tan \delta_\ell = \frac{s_\ell(\infty)}{c_\ell(\infty)}. \quad (1.55)$$

Al conocer los límites asintóticos de las funciones  $s_\ell(r)$  y  $c_\ell(r)$ , se pueden calcular los corrimientos de fase  $\delta_\ell$ . Se define la función  $t_\ell(r)$  de la siguiente forma:

$$t_\ell(r) = \frac{s_\ell(r)}{c_\ell(r)}. \quad (1.56)$$

La cual cumple con las siguientes condiciones a la frontera:

$$t_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\frac{V_0 r^{-m}}{k^2} \frac{(kr)^{2\ell+3}}{(2\ell+3-m)[(2\ell+1)!!]^2} \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad (1.57)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} t_\ell(r) \equiv t_\ell(\infty) = \tan \delta_\ell. \quad (1.58)$$

La condición en el origen para  $t_\ell(r)$ , considera el hecho que el potencial es un potencial regular, que cumple la condición dada por la ecuación (1.2), es decir, se considera que el potencial  $V(r)$  tiene el siguiente comportamiento en el origen:

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} V_0 r^{-m}, \quad m < 2. \quad (1.59)$$

La ecuación para la función  $t_\ell$  se obtiene a partir de diferenciar las ecuaciones para las funciones  $s_\ell$  y  $c_\ell$  (Ecs. (1.51) y (1.52)) y utilizando la ecuación (1.53):

$$\frac{dt_\ell}{dr} = -k^{-1} V(r) [\hat{j}_\ell(kr) - t_\ell \hat{n}_\ell(kr)]^2. \quad (1.60)$$

La Ec. (1.60) es una ecuación diferencial no lineal de primer orden para la función  $t_\ell$ , la cual se puede resolver de forma numérica o analítica. Esta ecuación puede tener polos, por lo que se utiliza la función fase  $\delta_\ell(r)$  que se relaciona con la función  $t_\ell(r)$  mediante la siguiente expresión:

$$t_\ell(r) = \tan \delta_\ell(r). \quad (1.61)$$

La función  $\delta_\ell$  cumple las siguientes condiciones a la frontera:

$$\delta_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\frac{V_0 r^{-m}}{k^2} \frac{(kr)^{2\ell+3}}{(2\ell+3-m)[(2\ell+1)!!]^2} \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0, \quad (1.62)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \delta_\ell(r) \equiv \delta_\ell(\infty) = \delta_\ell; \quad (1.63)$$

y satisface la siguiente ecuación:

$$\frac{d\delta_\ell}{dr} = -k^{-1}V(r)[\cos\delta_\ell(r)\hat{j}_\ell(kr) - \text{sen}\delta_\ell(r)\hat{n}_\ell(kr)]^2 \quad (1.64)$$

La Ec. (1.64) es la ecuación diferencial no lineal de primer orden para la función de fase  $\delta_\ell$  definido en la Ec. (1.63). La ecuación (1.64) se conoce como la *ecuación de fase*.

Para el caso en particular de bajas energías, onda-*s*, la ecuación de fase es:

$$\frac{d\delta_0(r)}{dr} = -k^{-1}V(r)\sin^2[kr + \delta_0(r)] \quad (1.65)$$

Al resolver la ecuación anterior se obtiene el corrimiento de fase para onda-*s* ( $\delta_0$ ), y por lo tanto se puede calcular la longitud de dispersión, que se definió en la Ec. (1.37) como:  $\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \tan \delta_0(k)/k$ . Como se ha mencionado este parámetro es importante pues lleva la información del potencial de interacción. En el Apéndice A se desarrolla un programa para resolver la ecuación (1.65).

## 1.2 Modelo de la dispersión en un sistema de canales acoplados.

En la presente sección se estudiará la dispersión en un sistema multicanal, el enfoque que se presenta es la dispersión en un sistema de dos canales en onda-*s*, que da lugar a las resonancias de Feshbach.

### 1.2.1 Descripción general.

En los experimentos de átomos alcalinos ultrafríos, éstos están en general, confinados por medio de una trampa magneto-óptica. Las interacciones entre los átomos se modifican al entonar un campo magnético externo, lo que produce un desdoblamiento en los niveles de energía debido al efecto Zeeman. Un canal de dispersión  $\gamma$  está definido por los eigenvalores asociados a la observable física de estudio, por lo que se puede decir que en ciertos casos los números cuánticos que describen cada átomo definen al canal de dispersión. Por ejemplo en los experimentos, un canal puede estar definido como:  $\gamma = f_1, m_{f_1}, f_2, m_{f_2}, \ell, m_\ell$ , donde  $f = j + i$ ;  $j$  es el momento angular total electrónico e  $i$  es el espín del núcleo,  $m_f$  es la proyección del momento angular  $f$ . Si la energía del canal  $E_\gamma = E_{f_1 m_{f_1}} + E_{f_2 m_{f_2}}$  es menor que la energía total del sistema  $E$  el canal es abierto ( $E_\gamma < E$ ). Mientras que, si la energía del canal es mayor que la energía total ( $E_\gamma > E$ ) el canal  $\gamma$  es cerrado [85]. Cuando la energía  $E$  es mucho más pequeña que la correspondiente a la del canal con menor energía, todos los canales son cerrados y  $E$  se refiere a unos de los estados discretos moleculares, por lo que el canal cerrado se asocia con estados moleculares. Si la energía  $E$  es mucho más grande que la energía del canal más baja, entonces por lo menos uno de los canales es abierto y la energía se asocia con un nivel de energía en el continuo, a estos estados se les conoce como estados de dispersión o estados asociados a dos átomos que colisionan.

En general, en un sistema multicanal, los canales se pueden definir de la siguiente forma: Consideremos un sistema físico cuya función de onda  $\psi$  depende de dos variables  $X$  y  $Y$ ,  $\psi(X, Y)$ , y  $\hat{O}$  es una observable que sólo actúa en las funciones de la variable  $Y$ , por lo tanto tenemos que en el caso que la función  $\psi(X, Y)$  sea el producto de las funciones  $\varphi(X)\phi(Y)$  se tiene: [86]:

$$\hat{O}\varphi(X)\phi(Y) = \varphi(X)\hat{O}\phi(Y), \quad (1.66)$$

las eigenfunciones  $\phi_n$  del operador  $\hat{O}$  definen un conjunto completo:

$$\hat{O}\phi_n = \varepsilon_n\phi_n; \quad (1.67)$$

donde  $\varepsilon_n$  son los correspondientes eigenvalores. Si la observable  $\hat{O}$  conmuta con el hamiltoniano del sistema  $H$ , entonces el problema se reduce a resolver una ecuación de estados estacionarios “reducida” para cada eigenvalor  $\varepsilon_n$  de la observable  $\hat{O}$ . Y cada eigenvalor  $\varepsilon_n$  define un **canal**, y la dinámica del problema reducido en la variable  $X$  en un canal dado no está acoplado al movimiento de los otros canales.

El acoplamiento entre canales sólo ocurre si la observable  $\hat{O}$  no conmuta con el hamiltoniano. Como las funciones  $\phi$  forman una base completa en el espacio de las funciones  $Y$ , se puede desarrollar la función  $\psi(X, Y)$  de todo el sistema en la siguiente base:

$$\psi(X, Y) = \sum_n \varphi_n(X)\phi_n(Y). \quad (1.68)$$

A las funciones  $\varphi_n(X)$  se les conoce como las funciones de onda del canal, las cuales se determinan al resolver la ecuación de Schrödinger. Sustituyendo la función de onda dada por la ecuación (1.68) en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo obtenemos:

$$\sum_n \hat{H}\varphi_n(X)\phi_n(Y) = E \sum_n \varphi_n(X)\phi_n(Y). \quad (1.69)$$

La forma más general de las ecuaciones acopladas para los canales, se obtiene al multiplicar por la izquierda a la Ec. (1.69) por  $\phi_m^*(Y)$  e integrar sobre  $Y$ , obteniendo:

$$\hat{H}_{m,m}\varphi_m(X) + \sum_{n \neq m} \hat{H}_{m,n}\varphi_n(X) = E\varphi_m(X) \quad (1.70)$$

$\hat{H}_{m,m}$  son los elementos diagonales del hamiltoniano, mientras que  $\hat{H}_{m,n}$  ( $m \neq n$ ) son los operadores del acoplamiento, los cuales son los operadores reducidos que actúan en el espacio solo de las funciones de onda  $\varphi_n(X)$ , y están definidos a partir de las funciones  $\phi_n(Y)$ :

$$\hat{H}_{m,n} = \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle_Y. \quad (1.71)$$

Las ecuaciones de canales acoplados se resuelven considerando la situación física que se está estudiando, con el fin de explotar las simetrías (en el caso que existan) del problema,

para poder reducir el número de canales acoplados. En el caso que el hamiltoniano  $\hat{H}$  se puede escribir como la suma de los hamiltonianos  $H_X$  y  $H_Y$  que actúan en las funciones  $X$  y  $Y$  respectivamente, las cuales están acopladas por un potencial  $V(X, Y)$ ,

$$\hat{H} = \hat{H}_X + \hat{H}_Y + V(X, Y), \quad (1.72)$$

se utilizan las eigenfunciones  $\phi(Y)$  de  $\hat{H}_Y$ , siendo las expresiones para los elementos diagonales del hamiltoniano de las ecuaciones acopladas:

$$\hat{H}_{m,m} = \hat{H}_X + \langle \phi_m | \hat{H}_Y | \phi_m \rangle_Y + \langle \phi_m | V(X, Y) | \phi_m \rangle_Y. \quad (1.73)$$

Los operadores acoplados y la energía están definidos de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{m,n} = V_{m,n}(X) = \int |\phi_m(Y)|^2 V(X, Y) dY, \quad (1.74)$$

$$E_m = \langle \phi_m | \hat{H}_Y | \phi_m \rangle_Y; \quad (1.75)$$

la energía corresponde a la energía interna de  $Y$ , de cada canal.

La función de onda  $\psi(X, Y)$  puede describir una partícula de masa  $m$ , (que en un sistema de dos partículas,  $m$  se refiere a  $\mu$ , la masa reducida), la cual se mueve en un potencial efectivo radial  $V_{eff}(r)$  y además interactúa con otras partículas ligadas, por lo que se puede usar la expansión en ondas parciales mencionada en la sección anterior, identificando  $X$  con la coordenada radial  $r$ , y  $Y$  como las variables angulares  $(\theta, \varphi)$  por lo que la función  $\psi(X, Y)$  es:

$$\psi = \sum_{n,\ell,m} \frac{\phi_{n,\ell,m}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \chi_n, \quad (1.76)$$

donde  $\chi_n$  son los estados ligados de las demás partículas. Las ecuaciones de canales acoplados son:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) + V_{k,k}(r) + E_k \right) \phi_k(r) + \sum_{k' \neq k} V_{k,k'}(r) \phi_{k'}(r) = E \phi_k(r), \quad (1.77)$$

$k$  denota los números cuánticos  $n, \ell, m$  o simplemente los números que describen al sistema físico en estudio.

Cuando el potencial de acoplamiento decae en el comportamiento asintótico  $r \rightarrow \infty$ , es cuando los canales se clasifican en *canales abiertos* y *canales cerrados*. En los canales cerrados el movimiento es ligado y las funciones de onda de los canales  $\phi_k(r)$  decaen asintóticamente, mientras que en el canal abierto el movimiento no es ligado y las funciones  $\phi_k(r)$  oscilan en el comportamiento asintótico. Si ahora suponemos que el potencial efectivo  $V_{eff}(r)$  y los potenciales  $V_{k,k}(r)$  decaen asintóticamente, los canales abiertos a una

energía dada  $E$  de todo el sistema son aquellos cuyos estados internos de energía  $E_k$  es menor que  $E$  ( $E_k < E$ ); mientras que cuando la energía de los estados internos es mayor que  $E$ , ( $E_k > E$ ) se les llama canales cerrados. Las energías internas  $E_k$  definen los llamados *umbrales de los canales*<sup>2</sup>, para valores de la energía mayores que este umbral las funciones de onda,  $\phi_k(r)$  en el canal adecuado tiene propiedades de funciones continuas. El umbral del continuo de todo el sistema coincide con el umbral del canal más bajo. En el caso donde los valores de las energías internas permitan la existencia de por lo menos un canal abierto, se tendrá siempre una solución de los canales acoplados.

### 1.2.2 Formalismo de los operadores de proyección y tipos de resonancias.

En un sistema multicanal, el modelo teórico supone que dos átomos interactúan por medio de dos curvas de potencial correspondientes a un canal abierto y a un canal cerrado. El canal cerrado representa estados ligados o moleculares, mientras que el canal abierto corresponde a la dispersión de dos átomos. Los átomos de nuestro interés tienen energías  $E \ll V_\infty$ , donde  $V_\infty$  es el valor al cual tiende el potencial que representa al canal cerrado a grandes distancias.

Experimentalmente se ha observado que la interacción entre los canales está débilmente acoplada. Debido a este acoplamiento, se puede entonar el campo magnético de tal forma que la energía del canal abierto, que representa a los átomos que pueden tener espín semientero, tiende a la del canal cerrado, que representa a estados moleculares que poseen espín entero, por lo que son bosones.

En ausencia del acoplamiento entre canales, el canal cerrado tiene un estado ligado de energía  $E_{mol}$ , entonando un campo magnético adecuado esta energía se puede ajustar al valor cero, que es el límite de disociación del canal abierto, es decir, las energías entre los canales son iguales, cuando coinciden dichas energías se dice que aparece una resonancia. Cuando hay un pequeño acoplamiento entre el canal abierto y el canal cerrado se espera que la amplitud de dispersión de los dos átomos cambie. Para obtener una expresión de la amplitud de dispersión cuando hay acoplamiento entre canales, que dan lugar a la resonancia, se utilizará un modelo simple de dos canales. En este modelo se considera que los átomos se encuentran libres en el canal abierto, y son estados moleculares únicamente en el canal cerrado.

Para poder describir la dispersión en un sistema multicanal se utiliza el formalismo de los operadores de proyección de Feshbach o simplemente formalismo de Feshbach, el cual fue introducido por Herman Feshbach [87]. En este método se definen dos operadores de proyección  $P$  y  $Q$  los cuales permiten separar la función de onda en una parte que describe al canal abierto y otra que describe al canal cerrado. Se obtiene una ecuación de

---

<sup>2</sup>en inglés, channel thresholds

Schrödinger para los canales abiertos utilizando un hamiltoniano efectivo a partir del cual se obtienen los eigenvalores, este método se describe a continuación [79, 88].

Sea  $P$  el operador de proyección que al actuar sobre toda la función de dispersión es tal que realiza la siguiente acción en el límite asintótico:

$$P\psi_a \rightarrow \psi_a. \quad (1.78)$$

Por ejemplo para un nucleón que incide en un núcleo que contienen  $N$  nucleones que es descrito por la función de onda  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  el operador se puede escribir como:

$$P\psi_a(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \mathcal{A}\varphi(\vec{r})\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N); \quad (1.79)$$

donde  $\mathcal{A}$  es el operador de antisimetrización,  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$  son las posiciones de los  $N$  nucleones.  $\psi_a$  es la función antisimetrizada del sistema. La función  $\varphi$  da el comportamiento asintótico de las amplitudes de dispersión.

También se define un operador  $Q$  definido por la relación  $Q = 1 - P$ . Estos operadores de proyección cumplen que:  $P^2 = P$  y  $Q^2 = Q$ ; y además son ortogonales entre sí:  $PQ = QP = 0$ . El operador  $Q$  está proyectado en el subespacio de los canales cerrados mientras que  $P$  en el subespacio de los canales abiertos. La ecuación de Schrödinger que describe un sistema de canales acoplados es:

$$(E - H_{PP})\Psi_P = H_{PQ}\Psi_Q, \quad (1.80)$$

$$(E - H_{QQ})\Psi_Q = H_{PQ}\Psi_P, \quad (1.81)$$

donde:  $\Psi_P \equiv P\Psi$ ,  $\Psi_Q \equiv Q\Psi$ ,  $H_{PP} \equiv PHP$ ,  $H_{QQ} \equiv QHQ$  y  $H_{PQ} \equiv PHQ$ .

Para poder resolver la Ec (1.81) se utiliza el método de la función de Green, obteniendo:

$$\Psi_Q = \frac{1}{E^+ - H_{QQ}} H_{PQ} \Psi_P, \quad (1.82)$$

donde  $E^+ = E + i\epsilon$ . Sustituyendo la función anterior en la Ec. (1.80):

$$(E - H_{eff})\Psi_P = 0, \quad (1.83)$$

donde  $H_{eff} = H_{PP} + H_{PQ} \frac{1}{E^+ - H_{QQ}} H_{QP}$ . Es el hamiltoniano efectivo para la dispersión. El operador de Green  $\frac{1}{E^+ - H_{QQ}}$  se escribe en términos de los eigenestados discretos y continuos del hamiltoniano  $H_{QQ}$ ,  $H_{QQ}\psi_m = \epsilon_m\psi_m$ :

$$\frac{1}{E^+ - H_{QQ}} = \sum_m \frac{|\phi_m\rangle\langle\phi_m|}{E - \epsilon_m} + \int d\epsilon \frac{|\phi(\epsilon)\rangle\langle\phi(\epsilon)|}{E^+ - \epsilon}. \quad (1.84)$$

Si la energía total  $E$  es cercana a un estado ligado de energía discreta  $\epsilon_0$ , sólo se considera al estado  $|\phi_B\rangle$  del hamiltoniano  $H_{QQ}$ , por lo tanto la Ec. (1.83) se reduce a:

$$(E - H_{PP})\Psi_P = \frac{H_{PQ}|\Psi_B\rangle\langle\phi_B|H_{QP}|\Psi_P\rangle}{E - \epsilon_0}, \quad (1.85)$$

cuya solución es:

$$|\Psi_P\rangle = |\Psi_i^+\rangle + \frac{1}{E^+ - H_{PP}} H_{PQ}|\phi_B\rangle \frac{\langle\phi_B|H_{QP}|\Psi_i^+\rangle}{E - \epsilon_0 - \langle\phi_B|H_{QP}\frac{1}{E^+ - H_{PP}}H_{PQ}|\phi_B\rangle}. \quad (1.86)$$

En el caso de colisiones frías, domina la dispersión en onda-s, por lo que en la descripción se utilizará la matriz  $S$ , la cual está relacionada con la matriz  $T$ :  $S = 1 - 2\pi iT$ . La matriz de dispersión  $T$ , es la que considera el acoplamiento de los canales  $Q$  y  $P$ , y está definida por  $T = \langle\phi_P|V_{eff}|\Psi_P\rangle$ , donde  $\phi_P$  es la función de onda no dispersada en el canal  $P$ . En este caso la matriz de dispersión  $T$  es :

$$T = T_p + \sum_i \frac{\langle\Psi_p^-|H_{PQ}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|H_{QP}|\phi_P\rangle}{E - \epsilon_0}, \quad (1.87)$$

donde  $|\Psi_p^\pm\rangle = |\phi_P\rangle + \frac{V_{PP}}{E^\pm - H_{PP}}|\phi_P\rangle$ .

La transición entre canales, en este caso al canal  $j$ , se determina por el comportamiento asintótico de la función  $\Psi_P$ , la transición ocurre de un estado resonante a un canal abierto, por lo que en términos de la matriz  $S$  se obtiene:

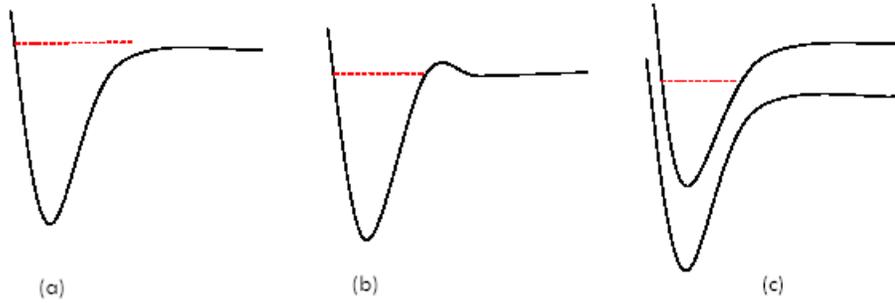
$$S = S_{ij} = S_p - 2\pi i \frac{\langle\Psi_j^-|H_{PQ}|\phi_B\rangle\langle\phi_B|H_{QP}|\Psi_i^+\rangle}{E - \epsilon_0 - \langle\phi_B|H_{QP}\frac{1}{E^+ - H_{PP}}H_{PQ}|\phi_B\rangle} \quad (1.88)$$

Donde el primer término de la ecuación anterior,  $S_p$  refleja el acoplamiento de sólo el canal  $P$ , y el segundo término es la amplitud de la onda saliente del canal  $j$  y el acoplamiento entre la onda entrante del canal  $i$  con el estado ligado. En el caso que sólo se considere un canal abierto  $i$ , observamos que el término del numerador, está relacionado con el ancho de la resonancia  $\Gamma = 2\pi|\langle\phi_B|H_{PQ}|\Psi_i^+\rangle|^2$ , el ancho de la resonancia es proporcional a la función de onda entrante con vector de onda  $k$ . Cabe resaltar, que depende de la energía de los átomos en la colisión, a través del factor de fase espacial. Mientras que el término  $\langle\phi_B|H_{QP}\frac{1}{E^+ - H_{PP}}H_{PQ}|\phi_B\rangle$  en el denominador, da lugar a un corrimiento de la energía del estado ligado,  $\Delta$  el corrimiento de la resonancia y a un término adicional relacionado con el ancho de la resonancia  $\frac{i\Gamma}{2}$ . Por lo que la ecuación (1.89) se puede reescribir:

$$S = S_{ii} \left( 1 - \frac{i\Gamma}{E - \epsilon_0 - \Delta + \frac{i\Gamma}{2}} \right) \quad (1.89)$$

El término  $\Delta$  da lugar a un corrimiento en la posición de  $\epsilon_s$  mientras que  $\Gamma$  controla el ancho de la resonancia. Si  $\Gamma$  es pequeña la resonancia es angosta; sobre la clasificación

resonancias se hablará en la siguiente sección. De la ecuación anterior, se nota que las resonancias son los ceros del denominador. Un estado resonante es aquél en el que ocurre la resonancia. Hay tres tipos de resonancias: resonancias de potencial, resonancias de forma y resonancias de Feshbach<sup>3</sup>. Los primeros dos tipos de resonancias ocurren en un modelo de un solo canal mientras que la resonancia de Feshbach es en el modelo de dos canales (Ver Figura 1.3).



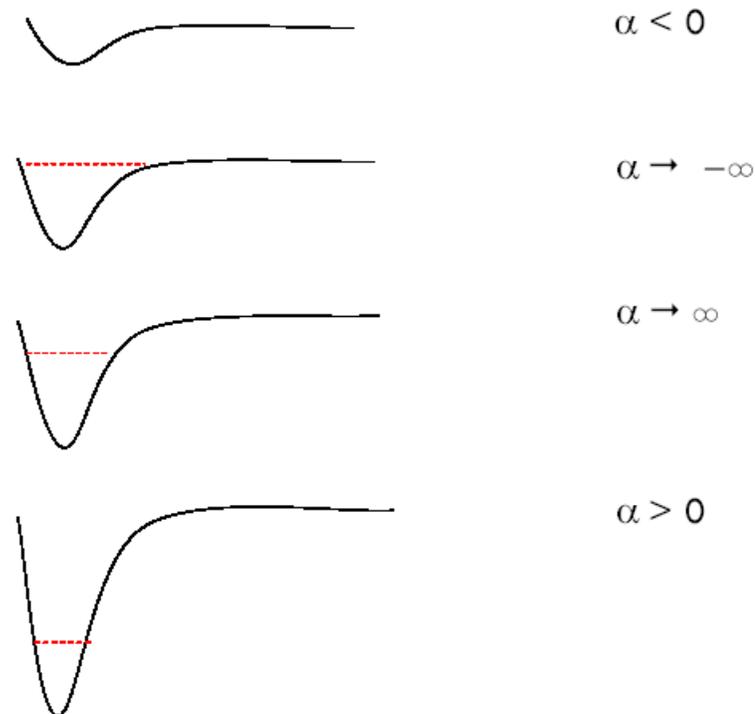
**Figura 1.3:** Tipos de resonancias. (a) Resonancia de Potencial. (b) Resonancia de Forma. (c) Resonancia de Feshbach.

Las resonancias de potencial son aquellas que dependen de qué tan profundo es el potencial, es decir dependen de la amplitud del potencial. Para un potencial atractivo cuya longitud de dispersión es negativa; si el potencial se hace cada vez más profundo, hay un incremento en los corrimientos de fase y por lo tanto la longitud de dispersión se hace más negativa. El corrimiento de fase eventualmente toma el valor de  $\pi$ , por lo que la función de onda tiene un nodo y en este caso la longitud de dispersión diverge a menos infinito. El nodo que apareció es una señal que un nuevo estado ligado ha aparecido. Si se incrementa la amplitud del potencial, la longitud de dispersión cambia abruptamente de signo y la magnitud va disminuyendo de más infinito a cero; nuevamente puede alcanzar el valor de menos infinito y crear otro estado ligado en el potencial. Este proceso de cambio de signo y magnitud de la longitud de dispersión se puede repetir y se crearán más estados ligados en el potencial cada vez que la longitud de dispersión diverge (Ver figura 1.4).

Las resonancias de forma se caracterizan por la presencia de una barrera de potencial en el potencial entre partículas. Ocurren cuando el potencial tiene la amplitud suficiente para inducir un estado resonante.

Las resonancias de Feshbach son diferentes a las resonancias descritas anteriormente pues ocurren en un sistema multicanal. Este tipo de resonancias se describirán en la siguiente sección.

<sup>3</sup>En inglés, potential resonances, shape resonances y Feshbach resonances, respectivamente.



**Figura 1.4:** Representación de un resonancia de potencial. Primero se tiene un potencial débilmente atractivo cuya longitud de dispersión es negativa. Conforme aumenta la profundidad del potencial la longitud de dispersión aumenta y se acerca a un estado resonante. Posteriormente la longitud de dispersión cambia de signo pero ya se creó un estado ligado. Conforme el potencial se vuelve más profundo el estado ligado se hace más profundo.

## 1.3 Resonancias de Feshbach en átomo ultrafríos.

### 1.3.1 Historia y descripción experimental.

En los gases atómicos ultrafríos, las interacciones entre los átomos se pueden manipular experimentalmente por medio de las resonancias de Feshbach, dando origen a diversos estudios como el cruce BEC-BCS, la superfluidez de los gases de Fermi ultrafríos o la creación de mezclas de gases de Bose y de Fermi. [89–93]. Las resonancias de Feshbach fueron observadas al entonar un campo magnético externo, y con ello modificar las energías de los dos estados accesibles al sistema átomo-átomo. Al variar el campo magnético, cambia el valor de la longitud de dispersión, que como ya se había mencionado, es el parámetro dominante de las colisiones de los átomos ultrafríos.

En general las resonancias aparecen cuando la energía de un estado ligado se acerca a la energía del continuo. Pero en el caso de las resonancias de Feshbach, (ver Figura 1.5) este es un sistema que involucra diferentes canales acoplados, la energía de un estado

ligado asociado a canales cerrados se acopla débilmente y decae a energías asociadas a canales abiertos, teniendo así un sistema de canales acoplados, donde hay transiciones entre los mismos. Dicho de otra forma las resonancias de Feshbach ocurren cuando la energía de un estado ligado del potencial de interacción es igual a la energía cinética de un par de átomos que colisionan. Esta situación sucede cuando el estado molecular existe en un potencial cuya energía es cercana a aquella asociada al estado de dispersión de dos átomos, es decir, el umbral de energía<sup>4</sup> entre estos estados es pequeño. Este tipo de umbrales de energía se encuentran presentes en los átomos alcalinos, y son debidos a su estructura hiperfina. Cuando se aplica el campo magnético externo a dichos átomos, los estados ligados o cuasi-ligados están asociados a un umbral en particular, el cual se desplaza por la presencia del campo magnético, esto da lugar a las siguientes opciones cuando se presentan las resonancias de Feshbach. Puede aparecer un estado molecular o ligado del potencial que representa al canal cerrado, lo cual implica un cambio en los corrimientos de fase de  $\pi$  radianes. Si la longitud de dispersión tiende a  $-\infty$  conforme  $B$  aumenta cerca del valor del campo en la resonancia  $B_r$  (cuando la intensidad del campo magnético es pequeña), se dice que la resonancia provino del potencial que representa el continuo. Los estados que se encuentran en el umbral del canal de entrada que aumentan conforme se incrementa el campo magnético, se conocen comúnmente como buscadores de campo débil<sup>5</sup>. Mientras que en los buscadores de campo fuerte<sup>6</sup>, las energías del umbral disminuyen conforme se incrementa la intensidad del campo magnético, además  $a \rightarrow \infty$  conforme  $B \rightarrow B_R$ , este tipo de estados pueden ser atrapados con métodos ópticos.

Para poder estudiar teóricamente las Resonancias de Feshbach se utiliza un formalismo conocido como formalismo de los operadores de proyección de Feshbach o simplemente formalismo de Feshbach, el cual se explicó en la sección anterior, y como se mencionó fue introducido por Herman Feshbach [87] para estudiar los procesos de colisión nucleares que llevan a la dispersión resonante, aunque este método también se aplica a las colisiones atómicas. El formalismo de Feshbach toma en cuenta el Principio de Pauli entre las partículas incidentes y las partículas blanco, además trata el problema de dispersión en el canal abierto introduciendo un potencial efectivo que describe el acoplamiento dentro y fuera del canal cerrado [94].

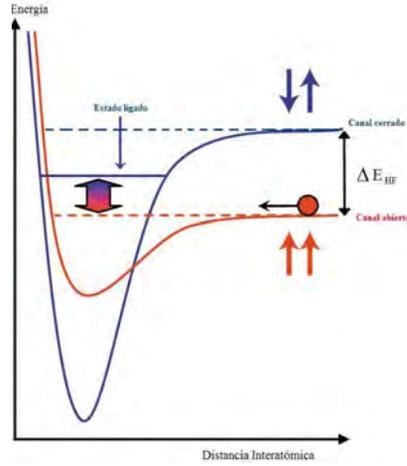
Como se ha mencionado, las resonancias de Feshbach a energía cero se realizan entonces un campo magnético externo. Esto fue predicho para el hidrógeno en 1976 y para átomos alcalinos fríos en 1993 [95]. En los experimentos de átomos ultrafríos, las resonancias de Feshbach abrieron una nueva brecha para estudiar las moléculas, pues en lugar de directamente enfriar las moléculas, éstas se podían crear a partir de un gas de átomos ultrafríos. Las primeras observaciones de las resonancias de Feshbach en átomos ultrafríos fueron realizadas en 1998 [93, 96], por el grupo de Ketterle, ellos utilizaron un

---

<sup>4</sup>En inglés, energy threshold

<sup>5</sup>En inglés, weak field seeking

<sup>6</sup>En inglés, strong field seeking states



**Figura 1.5:** Potenciales interatómicos que producen una resonancia de Feshbach. Despreciando la interacción Zeeman, en el comportamiento asintótico la energía está determinada por la suma de las energías hiperfinas de los átomos que colisionan, el desdoblamiento hiperfino es  $\Delta E_{HF}$ . Imagen tomada de [http://cua.mit.edu/ketterle\\_group/experimental\\_setup/BEC\\_I/background.html](http://cua.mit.edu/ketterle_group/experimental_setup/BEC_I/background.html)

condensado de átomos de sodio, por medio de técnicas de imagen, midieron el valor del campo magnético donde encontraron la resonancia y además observaron como la longitud de dispersión cambiaba tanto de magnitud como de signo, conforme se variaba el valor del campo magnético. Estas moléculas que se formaron tenían una vida media corta aproximadamente de  $100\mu s$ . En el caso de un gas de Fermi, este gas cerca de las resonancias es estable comparado con el gas de Bose, y las moléculas formadas tienen una vida media larga aproximadamente  $100ms$  para el  $^{40}K$  y de  $10s$  para  $^6Li$ . La estabilidad y el incremento en la vida media de estas moléculas es debido a que el principio de exclusión de Pauli inhibe las colisiones entre dímeros de diferente especie las cuales se presentan en el caso de un gas de Bose. En los últimos años las resonancias de Feshbach se han utilizado para estudiar los átomos ultrafríos y conseguir el llamado cruce BEC-BCS.

### 1.3.2 Descripción teórica.

A continuación consideramos solamente un sistema de dos canales acoplados, el cual está descrito por las siguientes ecuaciones de canales acopladas:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_1(r) \right) \phi_1(r) + V_{1,2}(r) \phi_2(r) = E \phi_1(r),$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_2(r) \right) \phi_2(r) + V_{2,1}(r) \phi_1(r) = E \phi_2(r), \quad (1.90)$$

para potenciales reales  $V_{1,2}(r) = V_{2,1}$ , lo que implica que, el hamiltoniano de este sistema es hermitiano. Suponemos que el canal 1 es abierto y el canal 2 es cerrado.

En el caso de un par de átomos alcalinos se considera que los átomos que colisionan se encuentran en el estado hiperfino más bajo, asociado con un canal abierto, mientras que el potencial interatómico asociado al estado hiperfino más alto tiene al menos un estado ligado, del canal cerrado. Debido a que los diferentes estados hiperfinos poseen diferentes momentos magnéticos, se puede entonar la energía del estado ligado al estado de una resonancia, utilizando la energía del par de átomos, mediante el empleo de un campo magnético externo [97]. En las colisiones ultrafrías de los átomos alcalinos en el estado base, para una intensidad dada del campo magnético, el umbral de los canales que determina cuales son abiertos y cuales son cerrados está dada por la combinación de la interacción Zeeman y de la estructura hiperfina. Además de dichas interacciones, el acoplamiento entre los canales se debe a la interacción de Coulomb (en concreto al término de intercambio) que es proporcional a la diferencia de las interacciones del singulete y del triplete.

En el límite de campo fuerte, el hamiltoniano  $H_{PQ}$ , definido en la Ec. (1.80), está relacionado con el término de la interacción hiperfina  $V_{HF}$ , dicha interacción se puede escribir sólo en este límite como  $V_{HF} = V_{HF}^+ + V_{HF}^-$ , donde  $V_{HF}^+ = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 + \vec{i}_2)$ ;  $V_{HF}^- = (\vec{s}_1 - \vec{s}_2) \cdot (\vec{i}_1 - \vec{i}_2)$ ,  $\vec{s}_k$  denota el espín electrónico e  $\vec{i}_k$  el nuclear, por lo que en este límite  $H_{PQ}$  es una perturbación débil y se relaciona con el término  $V_{HF}^-$ .

Para campos fuertes, la interacción de  $V_{HF}^-$  es despreciable a grandes distancias, los números cuánticos adecuados para describir al sistema en este límite son  $S$ ,  $M_S$ ,  $I$ ,  $M_I$ . Además, en esta región los operadores de proyección  $P$  y  $Q$  conmutan con el potencial Coulombiano de la interacción interatómica, y de este modo el hamiltoniano  $H_{PQ}$  corresponde a la interacción  $V_{HF}^-$ . Esto implica que  $H_{PQ}$  es una pequeña perturbación y por lo tanto el corrimiento de la resonancia  $\Delta$  es pequeño, y entonces la posición de la resonancia estará próxima a la posición de  $|\phi_0\rangle$  despreciando así la parte de  $V_{HF}^+$ . Esta identificación del hamiltoniano con la interacción hiperfina permite escribir la expresión del ancho de la resonancia como:

$$\Gamma = 2\pi |\langle \phi_0 | V_{HF}^- | \Psi_i^+ \rangle|^2; \quad (1.91)$$

En este caso  $\phi_0$  y  $\Psi_i$  describen estados tripletes y singuletes.

Para poder relacionar la descripción mencionada anteriormente con las colisiones ultrafrías, consideraremos 2 átomos en el mismo estado inicial de espín, la energía del umbral es  $E_{th}$  y  $E_i = E - E_{th}$  es la energía de la colisión. A bajas energías  $E_i$ , la función de onda  $\Psi_i^+$ , es proporcional a  $\sqrt{k_i} \sim E_i^{1/4}$ . En el límite de la interacción de intercambio (debido

al potencial de Coulomb) que corresponde a  $k \ll 1/a_{bg}$ <sup>7</sup>, la matriz  $S_{ii}$  es  $S_{ii} = e^{-2ik_i a_{bg}}$ , y podemos escribir la ecuación (1.89) de la siguiente manera:

$$S = e^{-2ik_i a_{bg}} \left( 1 - \frac{2iCk_i}{iCk_i - \varepsilon_{res}} \right); \quad (1.92)$$

En la ecuación anterior se utilizó el hecho de que el ancho de la resonancia es proporcional a  $k$ ,  $C > 0$  y  $\varepsilon_{res} = \epsilon_0 + \Delta(E_i = 0) - E_{th}(B)$  es la posición de la resonancia actual respecto al umbral. Como  $S = e^{-2ik_i a}$ , y en este caso la longitud de dispersión depende de la intensidad del campo magnético  $\alpha = \alpha(B)$ , se puede obtener la siguiente expresión para la longitud de dispersión:

$$\alpha(B) = \alpha_{bg} - \frac{C}{\varepsilon_{res}}. \quad (1.93)$$

La contribución de la resonancia a  $\alpha(B)$  es notable solo para valores de  $B$  cercanos a la intensidad del campo magnético  $B_0$ , pues es cuando la resonancia cruza el umbral. La dependencia del campo se debe a la interacción hiperfina y al efecto Zeeman, y es tomada en cuenta en  $\varepsilon_{res}$ :

$$\varepsilon_{res} = [2\mu_i(B_0) - \mu_0(B_0)](B - B_0) \quad (1.94)$$

Donde  $\mu_i(B)$  el momento magnético de un solo átomo en el estado hiperfino inicial y  $\mu_0(B)$  es el momento magnético del estado de resonancia de los dos átomos. Utilizando la definición de  $\varepsilon_{res}$  la longitud de dispersión en términos del campo magnético es:

$$\alpha(B) = \alpha_{bg} - \frac{C}{2\mu_i(B_0) - \mu_0(B_0)} \frac{1}{B - B_0}. \quad (1.95)$$

La forma más común de escribir la dependencia de la longitud de dispersión con el campo magnético y el ancho de la resonancia  $\Gamma$  es:

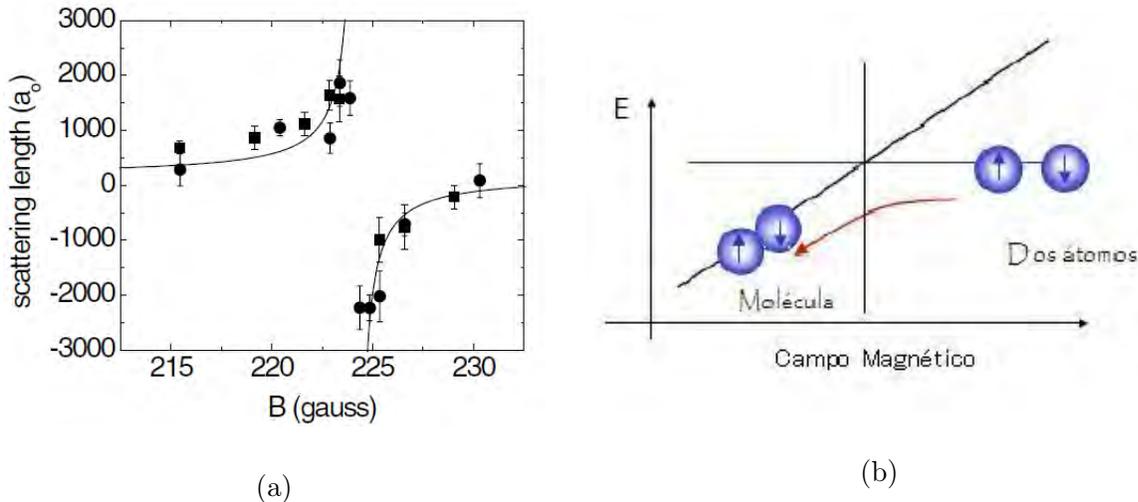
$$\alpha(B) = \alpha_{bg} \left( 1 - \frac{\Gamma}{B - B_0} \right). \quad (1.96)$$

La ecuación Ec. (1.96) permite relacionar la longitud de dispersión con el campo magnético; cambiando la magnitud del campo magnético la longitud de dispersión  $\alpha$  puede ser positiva o negativa como se muestra en la Figura 1.6. Cuando  $\alpha > 0$  hay formación de moléculas, cuando  $\alpha < 0$  hay pares de átomos en diferentes estados de espín, y cuando  $\alpha$  diverge se presenta la resonancia de Feshbach (ver Figura 1.6).

En relación con los átomos alcalinos, experimentalmente se induce una resonancia de Feshbach en la colisión de dos átomos al aplicar un campo magnético estático, el valor de la longitud de dispersión varía de  $\pm\infty$  conforme cambia el campo magnético alrededor del valor de la resonancia. El hamiltoniano efectivo para un sistema de dos partículas es:

---

<sup>7</sup> $a_{bg}$  es la longitud de dispersión de fondo, que corresponde al valor de la longitud de dispersión sin considerar el efecto del campo magnético; en inglés, background scattering length



**Figura 1.6:** (a) Dependencia de la longitud de dispersión, mediada en unidades del radio de Bohr  $a_0$ , respecto al campo magnético externo. Esta imagen fue tomada de: PRL **90** 230404. Los puntos corresponden a datos experimentales para  $^{40}\text{K}$ , la línea sólida corresponde a un ajuste hecho con la ecuación (1.96), donde  $a_{bg} = 174a_0$ ,  $B_0 = 224.21 \pm 0.05\text{G}$  y  $\Gamma = 9.7 \pm 0.6\text{G}$ . (b) Mediante las Resonancias de Feshbach entonando el campo magnético se pueden formar moléculas a partir de dos átomos.

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \sum H^{int} + V^c + V^d \quad (1.97)$$

$H^{int}$  representa la energía interna de los dos átomos, es decir, considera la interacción Zeeman y la hiperfina;  $V^c$  es la interacción de Coulomb y  $V^d$  es la interacción dipolar magnética. La interacción central o de Coulomb depende sólo de la distancia de las partículas por lo que conserva el momento angular  $\ell$  y el espín total  $F$  ( $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$ ,  $\vec{S}$  es el momento total electrónico e  $\vec{I}$  es el espín nuclear total) así como también conserva las proyecciones  $m_\ell$  y  $m_F$ . Además, de forma independiente se conserva  $\vec{S}$  e  $\vec{I}$ .

La interacción angular dipolar depende de las orientaciones relativas de los grados de espín, por lo que  $F$  y  $m_F$  deben de cambiar. La interacción dipolar es más débil que la interacción de Coulomb por lo que en el estudio de las resonancias se puede despreciar este término del hamiltoniano efectivo. El hamiltoniano que corresponde a la energía interna se puede considerar de la siguiente forma:

$$H^{int} = \frac{\alpha_h f}{\hbar^2} \vec{s} \cdot \vec{i} + (\gamma_e s_z - \gamma_n i_z) B_z, \quad (1.98)$$

$\alpha_{hf}$  es la constante hiperfina,  $\vec{s}$  es el espín electrónico e  $\vec{i}$  es el espín nuclear. El primer término del hamiltoniano de la ecuación anterior corresponde a la interacción hiperfina, mientras que el segundo considera el efecto Zeeman. Los estados de un solo átomo para la interacción hiperfina se denotan como  $|f, m_f\rangle$ ,  $\vec{f} = \vec{s} + \vec{i}$ ,  $f$  es un buen número cuántico sólo

para el caso de  $B = 0$ . En la región asintótica, el potencial de Coulomb se puede despreciar y el sistema de dos cuerpos es descrito por los eigenestados de cada átomo. En esta región los canales de dispersión se denotan como:  $\{f_1 m_{f_1} m_{f_2} m_{f_2}\}^\pm$ ; el signo  $+$  denota los estados de espín simétricos y el signo  $-$  los estados antisimétricos dependiendo del átomo en cuestión. Por ejemplo, para  ${}^7\text{Li}$  y  ${}^{23}\text{Na}$  que son átomos bosónicos se utiliza una función simétrica y para  ${}^6\text{Li}$  una función antisimétrica. En la región de distancias pequeñas es necesario utilizar una base que considere el hecho que la interacción de Coulomb es mucho más fuerte que la interacción hiperfina y la Zeeman. Dependiendo de la intensidad del campo magnético se puede utilizar la base conveniente ya sea  $| (SI)FM_F \rangle$  o  $| SM_S I, M_I \rangle$ .

### 1.3.3 Resonancias anchas y angostas.

En la sección anterior se mencionaron tres tipos de resonancias, entre las cuales destacan las Resonancias de Feshbach. En este tipo de resonancias, utilizando el formalismo de los operadores de proyección se pueden eliminar los canales cerrados y considerarlos dentro de un hamiltoniano efectivo para los canales abiertos. Para poder dar un criterio que pueda decir que los estados moleculares no se consideran explícitamente, y por lo tanto la descripción es de un solo canal, se consideran las escalas de energía del sistema. De la ecuación Ec. (1.89) estas escalas son:  $\Gamma$  el corrimiento de la energía respecto a resonancia,  $E$  la energía asociada al acoplamiento de canales y la energía de Fermi  $E_F$ , pues el sistema que se estudia son átomos fermiónicos.

Cuando  $E \gg E_F$  la resonancia se conoce como resonancia ancha<sup>8</sup> y se puede “eliminar” el estado molecular del canal cerrado. En este caso se puede usar la descripción de un solo canal para describir la física del problema, cerca de la resonancia de Feshbach, la cual es como un puente para pasar de longitudes de dispersión negativas a positivas. Mientras que, cuando  $E \ll E_F$  la resonancia se conoce como resonancia angosta<sup>9</sup>, el estado molecular afecta la física del problema de muchos cuerpos, por lo que es necesario incluir un modelo teórico multicanal.

---

<sup>8</sup>En inglés, broad resonance

<sup>9</sup>En inglés, narrow resonance

# Métodos experimentales para la generación de gases ultrafríos.

La realización del condensado de Bose-Einstein, así como del gas degenerado de Fermi fue debida al avance de métodos experimentales que permitieron primero confinar los átomos y posteriormente enfriarlos a temperatura del orden de micro o nano Kelvin. En el presente capítulo se hace una breve descripción de estos métodos así como de los experimentos más relevantes enfocados al estudio de los gases degenerados de Fermi, haciendo énfasis en algunos de los primeros experimentos que se realizaron en este rubro.

## 2.1 Métodos de confinamiento.

En los últimos años se han desarrollado diversas técnicas para atrapar y enfriar átomos neutros con lo que ha sido posible estudiar sus propiedades espectrales con mucha precisión, así como generar y estudiar estados cuánticos no triviales como la condensación de Bose-Einstein [1] (BEC) en átomos y moléculas, o los gases degenerados de Fermi [2] y, en condiciones apropiadas, el cruce entre estos dos estados. Los procesos de enfriamiento suelen estar relacionados con los procesos de confinamiento atómico, puesto que las interacciones magnéticas y ópticas utilizadas para atrapar átomos sin deformarlos son débiles y podrán ser efectivas sólo si la energía cinética de los átomos es menor o comparable al potencial de atrapamiento.

A grandes rasgos, las técnicas que se utilizan para atrapar átomos se clasifican en tres familias, dependiendo del mecanismo físico que emplean para confinar a los átomos [3]:

- Atrapamiento magnético: Utiliza la interacción debida al dipolo magnético de un átomo o molécula con el campo magnético externo, que varía espacialmente.

- Atrapamiento óptico: Se basa en la interacción entre el átomo y el campo del láser debido al dipolo eléctrico en el átomo durante una transición.
- Atrapamiento magnético-óptico: En este caso se utiliza la interacción de los átomos tanto con el láser como con el campo magnético externo.

### 2.1.1 Trampas magnéticas.

El atrapamiento de átomos con campos magnéticos [4, 5, 11] se basa en la interacción del dipolo magnético de un átomo o molécula con un campo magnético externo que varía espacialmente. En una primera aproximación semiclásica, dicho campo ejerce una fuerza:  $\vec{F} = \vec{\mu} \cdot \nabla \vec{B} = mg_J \mu_B \nabla |\vec{B}|$ , donde  $\mu$  es el momento magnético,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr,  $g_J$  es el factor de Landé y  $m$  es la proyección del momento angular total del átomo en la dirección z [98].

Para el atrapamiento de átomos uno de los factores importantes es la forma de la trampa, ya que se debe tomar en cuenta que las trampas deben de tener una configuración en la cual los átomos tengan un mínimo en el potencial de interacción [99]. La forma de la configuración está sujeta al teorema de Wing que dice que la magnitud de los campos magnéticos cuasiestáticos puede tener un mínimo local pero no un máximo local [100]. Debido a esto sólo se pueden confinar dentro de la trampa magnética ciertos estados que son aquellos en los que la energía se incrementa conforme se incrementa el campo; estos estados se les conoce como buscadores de campo débil.

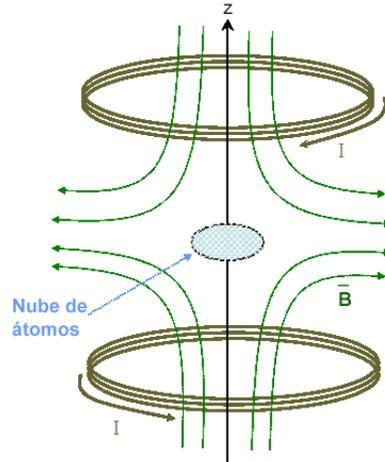
Una de las formas de clasificar las trampas magnéticas es mediante la configuración de la trampa, que depende del campo magnético, es decir, si el mínimo de  $|\vec{B}|$  es cero o no. Por ejemplo, las trampas magnéticas de cuadrupolo y esféricas de hexapolo tienen el  $|\vec{B}| = 0$ , mientras que la trampa de Ioffe tiene el  $|\vec{B}| \neq 0$ . A continuación se describen las trampas cuadrupolar y de Ioffe, las cuales son las más utilizadas para confinar los átomos, aunque cabe mencionar que existen otros tipos de trampas magnéticas como las citadas en la Referencia [5].

#### Trampa cuadrupolar.

La trampa cuadrupolar, Figura 2.1, consiste en dos espiras que se encuentran alineadas entre sí, y que poseen corrientes iguales pero en direcciones opuestas, esto produce un campo que posee un valor de cero en el centro de las espiras, y que se incrementa linealmente en cualquier dirección a partir de ese punto.

Cerca del centro, el campo se puede escribir como:

$$\vec{B} = B'_q \vec{\rho} + 2B'_q \vec{z}. \quad (2.1)$$



**Figura 2.1:** Trampa cuadrupolar.

Si las espiras están localizadas en  $\pm a_e$  alrededor del eje  $z$ ; donde  $a_e$  es el diámetro promedio de las espiras, el campo en la dirección  $z$ , a primer orden en la distancia al centro de las espiras, es:

$$B_z \sim \frac{3\mu I r^2 a_e}{(a_e^2 + r^2)^{5/2}} z, \quad \rho \sim 0. \quad (2.2)$$

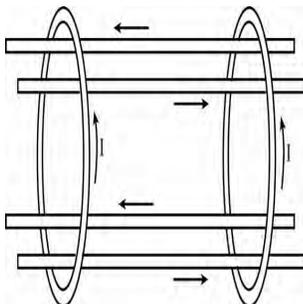
El primer experimento donde se atraparon átomos neutros de sodio por medio de campos magnéticos se realizó en 1985, utilizando una trampa magnética cuadrupolar. Esta trampa presenta un problema, porque en el centro de la trampa la dirección del campo cambia; una partícula que se dirige hacia el centro de la trampa siente en un lado una dirección del campo y del otro lado siente la dirección opuesta, por lo que no se puede orientar y no puede seguir el cambio en la dirección del campo adiabáticamente. A este efecto se le conoce como efecto del hueco, y se observa en experimentos donde la temperatura de las nubes de átomos es lo suficientemente baja para que la probabilidad de que los átomos queden cerca del centro y no puedan seguir el cambio en el campo magnético no sea despreciable. Para solucionar el problema del hueco se han utilizado varios métodos, uno de éstos es tapar al hueco mediante el uso de láseres que producen un potencial repulsivo que impide a la nube de átomos ver el hueco. El problema de este método es la dificultad del alineamiento del láser y la trampa, y que el láser produce calentamiento. Otro método es trasladar el hueco, mediante un campo que varíe con el tiempo. Finalmente una solución alternativa es usar una trampa que tenga otra geometría y que no tenga un campo igual a cero en su centro; esta trampa es conocida como trampa de Ioffe.

### Trampa de Ioffe.

La trampa de Ioffe consiste en cuatro barras con corriente que fluye en direcciones alternadas y un par de espiras alrededor de las barras con corriente que fluye en la misma dirección, como lo muestra la Figura 2.2. La característica de esta trampa es que el mínimo del campo magnético es distinto de cero ( $|\vec{B}| \neq 0$ ); para que el campo magnético tenga un mínimo en el centro es necesario que las espiras estén separadas por una distancia un poco mayor que  $r = a_e$ , donde  $a_e$  es el diámetro promedio de las espiras; a esta condición se le conoce como condición de Helmholtz. Las espiras generan un campo magnético radial que se opone al atrapamiento por lo que es importante en este tipo de trampas ajustar la geometría y la corriente de las barras de tal forma que el gradiente debido a las barras domine en la dirección radial. El campo magnético resultante para atrapar a los átomos en una trampa de Ioffe es armónico en el orden más bajo en la distancia al centro de la trampa y está dado por:

$$|\vec{B}| \propto B''_\rho \rho^2 + B''_z z^2, \quad (2.3)$$

donde  $B''_\rho$  es la curvatura radial y  $B''_z$  es la curvatura axial, y sus valores dependen de la geometría y de las corrientes.



**Figura 2.2:** Trampa de Ioffe.

Las trampas magnéticas tienen profundidades típicas del orden de  $100mK$ , y son excelentes herramientas para el enfriamiento evaporativo y la condensación de Bose-Einstein. Pero si se quiere enfocar estas trampas a otro tipo de experimentos hay una restricción, y es que el mecanismo de confinamiento de estas trampas se basa en el estado atómico interno del átomo, por lo que si se quieren hacer experimentos de la dinámica de los átomos, estos se limitarán a sólo unas cuantas especies de átomos cuyos estados sean compatibles con aquellos con los que ha sido diseñado el sistema. Además las geometrías que se pueden usar para diseñar las trampas están restringidas a usar arreglos de espiras y barras, por mencionar algunos.

### 2.1.2 Trampa dipolar óptica.

Las trampas dipolares ópticas se basan en la interacción del dipolo eléctrico con luz corrida, ya sea al rojo o al azul dada una transición atómica.

Las trampas dipolares ópticas [101, 102], fueron consideradas por primera vez como mecanismos para confinar átomos por Askar'yan en 1962, pensando en plasmas así como en átomos neutros. La posibilidad de atrapar átomos con esta fuerza fue considerada por Letokhov en 1968, quien sugirió que los átomos podrían ser atrapados en los nodos o antinodos de una onda estacionaria corrida ya sea por debajo (corrimiento hacia el rojo) o por arriba (corrimiento hacia el azul) de la frecuencia de transición atómica; esto es un antecedente directo de las redes ópticas. Ashkin en 1970, demostró el atrapamiento de partículas micrométricas en un rayo láser con base en la presión de radiación. Posteriormente en 1980, sugirió trampas de este tipo en tres dimensiones para atrapar átomos neutros. En 1986, Chu *et al* [103], utilizaron la fuerza del dipolo para realizar la primer trampa para átomos neutros.

Los métodos empleados comúnmente para atrapar y enfriar átomos están basados en las fuerzas que actúan en los átomos debida a los campos de un láser, o a otros campos electromagnéticos. Tanto las trampas dipolares ópticas como el enfriamiento Doppler, se basan en la interacción del dipolo eléctrico inducido por la luz en los átomos y el campo eléctrico asociado a esta misma luz. La interacción dipolo-luz, produce una fuerza total compuesta de dos contribuciones, una es de carácter conservativo y es la encargada de confinar a los átomos que es la que se utiliza en las trampas dipolares. La otra contribución es de carácter disipativo y es la que los puede enfriar.

Consideremos un átomo de dos niveles que interactúa con un rayo láser cuyo campo eléctrico,  $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t) = \hat{e}E_0(\vec{r})e^{-i\omega t} + c.c.$ , induce un momento dipolar atómico ( $\vec{p} = \vec{p}(\vec{r}, t) = \hat{e}p_0(\vec{r})e^{-i\omega t} + c.c.$ ), el cual oscila con una frecuencia  $\omega^1$ ;  $\hat{e}$  es el vector unitario de polarización. La magnitud del momento dipolar  $p_0$ , se relaciona con la amplitud del campo eléctrico  $E_0$ , por medio de la siguiente ecuación [4]:

$$\vec{p}_0 = \tilde{\alpha}\vec{E}_0; \quad (2.4)$$

donde  $\tilde{\alpha}$  es la polarizabilidad compleja, la cual depende de la frecuencia  $\omega$ .

La interacción del momento dipolar inducido ( $\vec{D}$ ) con el campo eléctrico que varía espacialmente ( $\vec{E} = \vec{E}(r, t)$ ), produce una fuerza de radiación dipolar en el átomo,  $\vec{F} = -\nabla U$  con  $U$  la energía de la interacción entre el átomo y el campo del láser:

$$U = \langle V \rangle = - \langle \vec{D} \rangle \cdot \vec{E}, \quad (2.5)$$

---

<sup>1</sup>En inglés esta frecuencia se conoce como driving frequency

$$\vec{F} = -\nabla U = \nabla(\langle \vec{D} \rangle \cdot \vec{E}) = \langle D_i \rangle \nabla E_i. \quad (2.6)$$

Esta fuerza de radiación se produce debido al intercambio de momento entre el átomo y el campo del láser. El cambio de momento es debido a los procesos de absorción y emisión de fotones; la absorción es estimulada y la emisión es espontánea.

La fuerza total la podemos escribir de la siguiente manera:

$$\vec{F} = \vec{F}_{pr} + \vec{F}_{gr}, \quad (2.7)$$

$$\vec{F}_{pr} = \hbar \vec{k} \Gamma \frac{G(\vec{r})}{1 + G(\vec{r}) + \frac{(\delta - \vec{k} \cdot \vec{v})^2}{\Gamma^2}}, \quad (2.8)$$

$$\vec{F}_{gr} = \frac{1}{2} \hbar (\delta - \vec{k} \cdot \vec{v}) \frac{\nabla G(\vec{r})}{1 + G(\vec{r}) + \frac{(\delta - \vec{k} \cdot \vec{v})^2}{\Gamma^2}}. \quad (2.9)$$

En las ecuaciones anteriores  $\delta$  representa la diferencia de frecuencia de la transición y del láser  $\delta = \omega - \omega_0$ ,  $\Gamma$  es la anchura de la línea y  $G(\vec{r})$  es el parámetro de saturación definido por:

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left( \frac{dE_0(\vec{r})}{\hbar \Gamma} \right)^2 = \frac{I(\vec{r})}{I_s}, \quad (2.10)$$

$I(\vec{r}) = (\frac{c}{8\pi})E_0^2$ , es la intensidad del láser en el punto  $\vec{r}$ ,  $I_s = (\frac{c}{4\pi}(\frac{\hbar \Gamma}{d})^2)$  es la intensidad de saturación, la cual indica la cantidad de fotones emitidos espontáneamente por átomo por unidad de tiempo y  $d = \vec{d} \cdot \vec{e}$ , es la proyección del momento dipolar en el vector de polarización  $\vec{e}$  del láser.

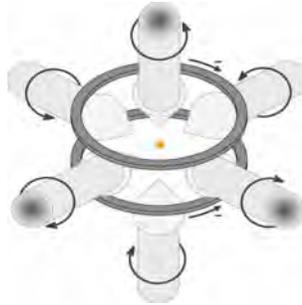
La fuerza de presión de radiación en un átomo puede aprovecharse para enfriarlo. Al mecanismo se le llama enfriamiento Doppler, el cual será descrito la sección de enfriamiento láser.

La fuerza de gradiente es debida a la interacción del momento dipolar inducido de un átomo con el campo del láser el cual es inhomogéneo, dicho campo se puede ver como una superposición de ondas planas propagándose en la dirección del haz. En este campo el momento cambia por medio de la absorción *inducida* de un fotón asociado a una onda plana y la emisión *inducida* de un fotón asociado a otra onda plana; al haber un gradiente de campo, estos fotones tendrán diferente sentido de propagación y este proceso producirá una fuerza de gradiente  $\vec{F}_{gr}$ ; que está dirigida a lo largo del gradiente de intensidad del láser y jala al átomo o lo empuja del centro, dependiendo del signo del corrimiento  $\Delta = \delta - \vec{k} \cdot \vec{v}$ . Por debajo de la resonancia atómica, es decir, en el corrimiento al rojo donde  $\Delta < 0$ , el potencial dipolar es negativo, por lo que la interacción atrae a los átomos al campo del láser; y los mínimos del potencial se encuentran en las posiciones donde la intensidad es

máxima. Mientras que por encima de la resonancia, es decir, en el corrimiento al azul  $\Delta > 0$ , la interacción dipolar repele a los átomos fuera del campo, y los mínimos del potencial corresponden a los mínimos de la intensidad. De acuerdo a esto, las trampas dipolares se clasifican en dos tipos: las trampas dipolares corridas al rojo y las trampas dipolares corridas al azul.

### 2.1.3 Trampa magnético-óptica.

La trampa magneto-óptica, (MOT)<sup>2</sup>, fue desarrollada por primera vez en 1987, mediante una colaboración entre los Laboratorios MIT-Bell, por Raab *et al* [104], y es utilizada frecuentemente para atrapar a los átomos [11, 105, 106].



**Figura 2.3:** Trampa magneto-óptica. Imagen tomada de la referencia [105].

La MOT emplea tanto campos magnéticos inhomogéneos como los campos de los rayos láser. Consiste en un gradiente de campo magnético el cual es generado por medio de un campo cuadrupolar producido por una configuración de 2 espiras y tres pares de rayos láser circularmente polarizados que están colocados en direcciones opuestas, Figura 2.3 y están corridos al rojo respecto de una transición atómica y se intersectan en ángulos rectos en las posiciones donde el campo magnético es cero [3]. Debido a que el campo magnético varía espacialmente esto implica que los niveles atómicos de energía también dependen de la posición; al utilizar la polarización circular y un corrimiento de los rayos láser hacia el rojo ( $\delta \sim \Gamma$ ) la probabilidad de transición depende espacialmente, lo que produce una fuerza restitutiva que empuja al átomo hacia el origen, y esta fuerza de radiación también depende de la posición.

El atrapamiento atómico funciona mediante el bombeo de los átomos que se mueven lentamente en un campo magnético lineal inhomogéneo  $\vec{B}$ ; el campo en la dirección del eje  $z$ , y cercano al origen, se puede aproximar como  $\vec{B}(z) \sim Az\hat{z}$ ; donde  $A$  es una constante. Primero consideremos un modelo unidimensional de la MOT [98], como se muestra en

<sup>2</sup>Por sus siglas en inglés, Magneto Optical Trap.

la Figura 2.4, en la cual se observa una transición del estado base  $J_g = 0$  al estado  $J_e = 1$  el cual tiene los desdoblamientos  $m = 0, m = \pm 1$  debido al efecto Zeeman. Los láseres tienen polarizaciones circulares opuestas ( $\sigma_+$  y  $\sigma_-$ ) y están desentonados por una cantidad  $\delta$  corrida hacia el rojo respecto a la frecuencia de transición atómica. Debido al efecto Zeeman los subniveles  $m = 1$  y  $m = -1$  tienen desdoblamientos lineales en  $z$ . Las polarizaciones  $\sigma_+$  y  $\sigma_-$  inducen las transiciones  $\Delta m = +1$  y  $\Delta m = -1$  respectivamente. Un átomo que se mueve desde la derecha va a interactuar más con el rayo  $\sigma_-$  que con el rayo  $\sigma_+$ , y estará en resonancia con el rayo  $\sigma_-$  en la posición  $z = z'$  de la Figura 2.4. La fuerza neta en el átomo lo impulsa hacia el centro de la trampa donde el campo magnético es cero. Así mismo, un átomo que se mueve desde la izquierda va a interactuar más con el rayo  $\sigma_+$  que con el rayo  $\sigma_-$  siendo resonante en  $z = -z'$ , y será impulsado hacia el centro de la trampa. El resultado de ambos casos es una fuerza restitutiva en  $z = 0$  que da lugar al confinamiento de los átomos en el centro de la MOT.

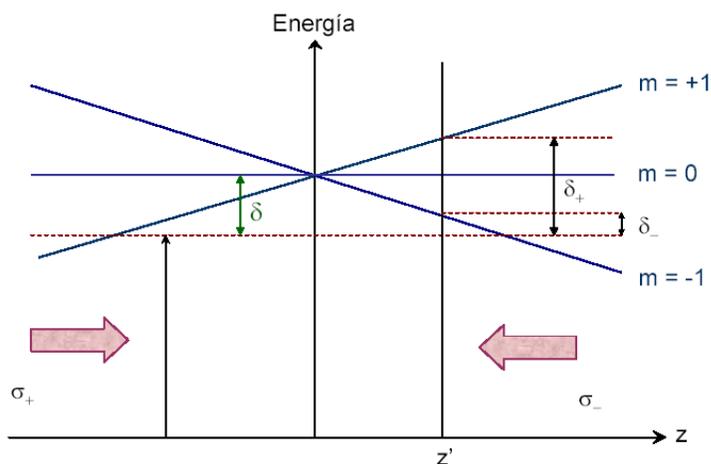


Figura 2.4: Modelo unidimensional de la MOT.

Un argumento similar permite entender el confinamiento en tres dimensiones utilizando seis rayos láser. Las transiciones atómicas involucran más de dos niveles y conllevan un efecto disipativo muy importante que será descrito en la sección denominada enfriamiento Sísifo.

## 2.2 Métodos de enfriamiento.

Para poder atrapar a los átomos mediante los procesos antes descritos es requisito enfriarlos. Si se desea además alcanzar el régimen de los gases degenerados es necesario llevar al sistema a temperaturas aún más bajas, del orden de micro a nano-Kelvin. En esta sección se hace una breve descripción sobre las técnicas de enfriamiento las cuales han permitido que durante las últimas tres décadas, la física atómica haya tenido progresos espectaculares

basados en los métodos experimentales para enfriar a los átomos; dichas técnicas son el enfriamiento láser y el enfriamiento evaporativo. En el caso del enfriamiento láser, usando intercambios de energía y momentos resonantes o casi-resonantes entre átomos y luz es posible obtener muestras de átomos a temperaturas muy bajas con velocidades en el rango de cm/s y mm/s. Un mayor enfriamiento e incremento de la densidad se obtiene por medio del método de enfriamiento evaporativo. Estos avances abren nuevas brechas de investigación que van desde espectroscopía de alta resolución y relojes atómicos a interferencia atómica, condensación de Bose-Einstein y toda una familia de experimentos realizados en los gases degenerados de Fermi que involucran el cruce BCS-BEC, y el estudio de gases moleculares.

### 2.2.1 Enfriamiento láser.

En el enfriamiento láser, los átomos básicamente interactúan con conjuntos de láseres colocados apropiadamente. El enfriamiento resulta de la competencia de dos efectos: el amortiguamiento del momento atómico debido a la fuerza de fricción que se origina de diversos tipos de mecanismos que dependen de la velocidad (enfriamiento Doppler o Sísifo) y el incremento de momento, o difusión de momento debido a las fluctuaciones de las fuerzas radiativas.

Usualmente en los esquemas de enfriamiento láser un ensemble de átomos interactúa con los rayos láser los cuales tienen polarizaciones, intensidades y frecuencias adecuadas, de tal forma que el momento atómico está amortiguado. En el esquema de enfriamiento Doppler el amortiguamiento se debe a un imbalance entre la fuerza de presión de radiación inducidas por el efecto Doppler y que resulta en una fuerza neta opuesta a los movimientos atómicos. En el esquema de enfriamiento Sísifo, los átomos corren en colinas de potencial (donde se desaceleran) más frecuentemente que si van colina abajo, el resultado es un decremento de la energía cinética atómica.

La idea básica del enfriamiento láser es que los fotones de un rayo láser puede dar momento a los átomos. Dentro de las técnicas conocidas como enfriamiento láser se encuentran: el enfriamiento Doppler que es la técnica de enfriamiento láser más simple, y el enfriamiento Sísifo. A continuación se hace una breve descripción de estas técnicas.

#### Enfriamiento Doppler

En el enfriamiento Doppler [9–11], se disminuye la velocidad de los átomos utilizando fotones de rebote, es decir, fotones producidos por un láser que provienen de procesos de absorción inducida y emisión espontánea de los átomos.

Si el láser tiene una frecuencia  $\omega_0$ , (es decir, el láser está en resonancia con el átomo), los fotones excitarán al átomo transfiriéndole momento en la dirección de propagación del

láser, posteriormente el átomo decaerá a su estado base emitiendo un fotón con la misma frecuencia pero en dirección aleatoria (emisión espontánea).

Consideremos el caso en que el átomo se mueve con una velocidad  $v$  en sentido contrario a la dirección de propagación del láser, cuya frecuencia es  $\omega$ , corrida al rojo respecto a la frecuencia de transición del átomo  $\omega_0$ , el átomo en su sistema de referencia, recibe fotones con frecuencia  $\omega + \delta$ , si esta frecuencia se encuentra en resonancia con el átomo, ( $\omega + \delta \sim \omega_0$ ), entonces el átomo será excitado y su velocidad disminuirá debido a la conservación del momento. Después de cierto tiempo, el átomo decaerá al estado base, emitiendo un fotón con frecuencia  $\omega_0 > \omega$ ; al repetir este proceso varias veces, el átomo se frenará.

Como ya se mencionó en la sección de la trampa dipolar, la interacción del átomo con el campo eléctrico del láser produce dos fuerzas, las cuales son la fuerza de gradiente y la fuerza de presión de radiación. Esta última, Ec. (2.8), es la encargada de enfriar a los átomos; está en la dirección del vector de propagación del láser y es proporcional al ancho de línea.

Si ahora considerados que el sistema es el átomo y dos láseres que se propagan en direcciones opuestas, los cuales tienen la frecuencia corrida al rojo respecto a la transición atómica, entonces, dependiendo de la velocidad del átomo, éste verá a los fotones de un láser corridos al azul y los del otro aún más corridos al rojo. La fuerza de radiación es la suma de la fuerza de cada uno de los láseres:

$$\vec{F}(\vec{v}) = \vec{F}_{pr}(\vec{k}) + \vec{F}_{pr}(-\vec{k}). \quad (2.11)$$

Si suponemos que el corrimiento Doppler es despreciable comparado con el ancho de línea  $\vec{k} \cdot \vec{v} \ll \Gamma$  la fuerza de radiación es:

$$\vec{F}(\vec{v}) = \frac{4\hbar k^2 G \delta}{\Gamma} \left( \frac{1}{1 + G + \frac{\delta^2}{\gamma^2}} \right)^2 \vec{v} = \tilde{\alpha} \vec{v}. \quad (2.12)$$

La fuerza es proporcional a la velocidad atómica a través del coeficiente de fricción,  $\tilde{\alpha} = 4\hbar k^2 G \delta / \Gamma (1 + G + \delta^2 / \gamma^2)$ , y depende del signo de  $\delta$ , por ejemplo  $\tilde{\alpha} > 0$  cuando hay corrimiento hacia el rojo. Los átomos sienten una fuerza de amortiguamiento, Ec. (2.12), por lo que se mueven como si estuvieran en un medio viscoso, creado por el láser, a este fenómeno se le conoce como melazas ópticas<sup>3</sup>. En este límite donde  $\vec{k} \cdot \vec{v} \ll \Gamma$ , se define la temperatura Doppler como [98]:

$$k_B T = \frac{\hbar \Gamma}{4} \frac{1 + (2\delta/\Gamma)^2}{2\delta/\Gamma}. \quad (2.13)$$

Esta temperatura es mínima cuando el valor del corrimiento corresponde a  $\delta = -\Gamma/2$ , a este valor de la temperatura se le conoce como el límite del enfriamiento Doppler:

---

<sup>3</sup>En inglés, optical molasses

$$k_B T_D = \frac{\hbar\Gamma}{2}, \quad (2.14)$$

Usando el método de enfriamiento Doppler, S. Chu *et al.* [103] pudieron enfriar en 1985 una nube de  $10^5$  átomos de sodio a una temperatura de alrededor de  $240\mu K$ .

### Enfriamiento Sísifo

En 1988, el límite inferior para las temperaturas predichas teóricamente para el enfriamiento por efecto Doppler fue superado en configuraciones experimentales que utilizaban láseres contrapropagantes con gradientes de polarización, sin que hubiese una clara explicación del mecanismo subyacente [107, 108]. Por ejemplo, la temperatura Doppler para el sodio es del orden de  $240\mu K$ , mientras que la obtenida experimentalmente era de  $40\mu K$  [108]. Estas bajas temperaturas se aproximan a la llamada temperatura de rebote  $\tau_R$ , la cual está relacionada con la energía cinética de rebote que se imparte a un átomo de masa  $m$  en reposo cuando absorbe un fotón de momento  $\hbar\vec{k}$ :

$$\tau_R = \frac{(\hbar k)^2}{2m}. \quad (2.15)$$

La explicación a las bajas energías presentadas resultó en un mecanismo alternativo de enfriamiento, el cual es conocido como enfriamiento Sísifo. El primer esquema planteado para obtener este enfriamiento consideraba un sistema de dos niveles y láseres cuya frecuencia podía estar incluso sintonizada hacia el azul en lugar del rojo respecto a la frecuencia de transición [109]. Esta configuración fue comprobada experimentalmente [110]. Sin embargo, las fluctuaciones del potencial efectivo resultaban muy difíciles de controlar, al grado de conducir en algunos casos, al calentamiento del átomo en lugar del enfriamiento buscado.

Por otra parte, los experimentos arriba mencionados corresponden a una realización accidental del esquema Sísifo. Para poder entender el enfriamiento Sísifo de átomos alcalinos en la configuración de estos experimentos es necesario considerar los siguientes elementos: (i) los gradientes de polarización de los campos eléctricos de los láseres, (ii) el que los átomos alcalinos no son simplemente átomos de dos niveles, por lo que puede existir un bombeo óptico entre sus subniveles y (iii) el corrimiento Stark de los átomos debido al campo eléctrico de la luz [9, 10].

El campo de radiación producido por dos láseres contrapropagantes con polarizaciones lineales perpendiculares es inhomogéneo, de tal suerte que la polarización del campo depende de la posición, generando así gradientes de polarización. Para ejemplificar esto consideramos que el rayo láser que se propaga en la dirección positiva  $z$  está linealmente polarizado en el eje- $x$  y el rayo láser que se propaga en la dirección negativa  $z$  está linealmente polarizado en la dirección  $y$ ; en este caso el campo eléctrico es de la forma [111]:

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}(z)e^{-i\omega_L t} + \vec{E}^*(z)e^{i\omega_L t}, \quad (2.16)$$

donde el vector de campo  $\vec{E}(z)$  es:

$$\vec{E}(z) = E_0(\hat{e}_x e^{ikz} + \hat{e}_y e^{-ikz}) = E_0 e^{ikz} (\hat{e}_x + \hat{e}_y e^{-2ikz}) = \sqrt{2} E_0 e^{ikz} \hat{e}(z). \quad (2.17)$$

De la ecuación anterior se observa que la polarización  $\hat{e} = \hat{e}(z)$  del campo del láser varía en el espacio, por lo que se pueden obtener los siguientes valores dependiendo de la posición  $z$ :

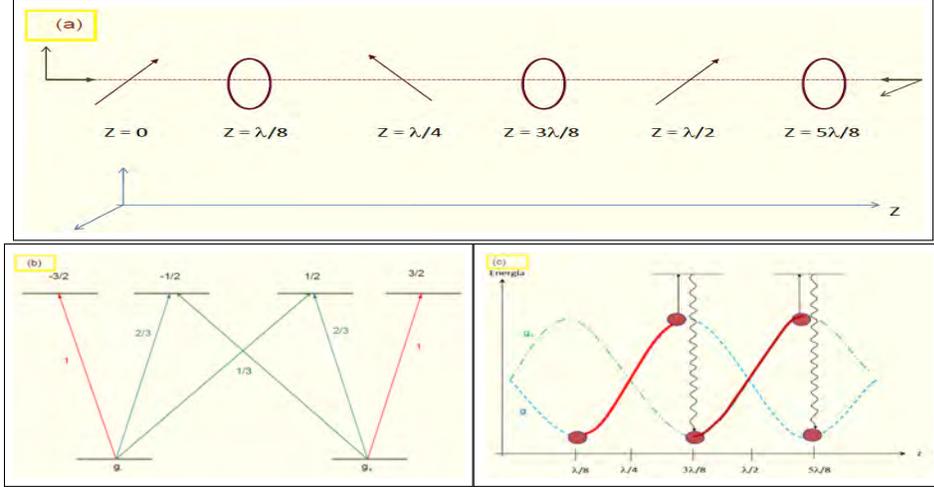
- Para  $z = 0$  el campo está linealmente polarizado y a  $45^\circ$  respecto al eje  $z$ ; siendo la polarización:  $\hat{e}(0) = \frac{(\hat{e}_x + \hat{e}_y)}{\sqrt{2}}$ .
- Para  $z = \lambda/8$  se obtiene  $\hat{e} = (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)/\sqrt{2}$ ; por lo que el campo está circularmente polarizado a la izquierda  $\sigma_-$ , en el sentido negativo del eje  $z$ .
- Para  $z = \lambda/4$  se obtiene  $\hat{e} = (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)/\sqrt{2}$ ; por lo que el campo está linealmente polarizado e inclinado a  $-45^\circ$  del eje  $z$ .
- Para  $z = 3\lambda/8$  se obtiene polarización circular derecha,  $\sigma_+$ , es decir en el sentido positivo.

En general, el estado de polarización del campo se puede escribir como una superposición de dos estados circularmente polarizados con vectores  $\hat{e} = (\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y)/\sqrt{2}$ , ver Figura 2.5.a.

Como se mencionó, para entender este fenómeno, los átomos alcalinos no se pueden considerar simplemente como sistemas de dos niveles, pues el estado base,  $g$  está degenerado en ausencia de campo magnético, dando lugar a los subniveles Zeeman  $g_m$ . En estos subniveles se da un bombeo óptico, el cual consiste en la transferencia de átomos de un subnivel  $g_m$  a otro  $g_{m'}$ , a través de ciclos de absorción y emisión. El tiempo medio que le toma al átomo para pasar de un subnivel  $g_m$  a otro  $g_{m'}$  se le conoce como tiempo de bombeo óptico  $\tau_P$  el cual es:

$$\tau_P = 1/\Gamma';$$

donde  $\Gamma'$  es la razón de dispersión media de fotones, que también se puede considerar como el ancho del estado. Por ejemplo, si se considera la transición de un átomo alcalino, despreciando el spin nuclear, de un estado  $^2S_{1/2}$  a un estado  $^2P_{3/2}$ , se tiene que el estado base  $J_g = 1/2$  está doblemente degenerado dando lugar a los estados  $g_-$  y  $g_+$ , estos estados se acoplan a los cuatro estados excitados de  $J_e = 3/2$ . La probabilidad de transición entre los estados base y los excitados está dada por los coeficientes de Clebsch-Gordan, y debido a las reglas de selección cada estado base se acopla con tres estados excitados como se



**Figura 2.5:** (a) Gradiente de polarización dependiente de la posición producido por la superposición de los láseres contrapropagantes con polarización perpendicular. (b) Transiciones dipolares entre el estado base correspondiente a  $J_g = 1/2$ , el cual está degenerado, acoplado con el estado excitado  $J_e = 3/2$ . Los números indican el peso relativo de la probabilidad para las transiciones indicadas, la cual está dada por el cuadrado de los correspondientes coeficientes de Clebsch-Gordan. (c) Enfriamiento Sísifo. Debido al tiempo de bombeo  $\tau_p$  originado por el bombeo óptico, el átomo pasa la mayor parte de su tiempo subiendo la colina del potencial. La velocidad del átomo en la figura es tal que  $v\tau_p \sim \frac{\lambda}{4}$ ; en este caso el átomo viaja una distancia del orden de  $\lambda$  en un intervalo de tiempo  $\tau_p$ .

muestra en la Figura 2.5.b. Este acoplamiento depende de la polarización de la luz, por ejemplo, el campo de  $\sigma_+$  acopla el estado  $|1/2 \ 1/2\rangle$  con el estado  $|3/2 \ 3/2\rangle$ , mientras que  $\sigma_-$  acopla el mismo estado  $|1/2 \ 1/2\rangle$  con el estado  $|3/2 \ -1/2\rangle$ , y la polarización lineal acopla nuevamente al estado  $|1/2 \ 1/2\rangle$  con el estado  $|3/2 \ 1/2\rangle$ .

El último elemento para la descripción del enfriamiento Sísifo son los desplazamientos o corrimientos de luz, los cuales provienen de la interacción óptica, pues el campo del láser induce un corrimiento de energía  $\hbar\delta'$ , que puede variar de un subnivel a otro. Para poder conocer el origen de este corrimiento de energía es conveniente considerar el esquema de los *estados vestidos*, los cuales son estados entrelazados del sistema átomo-campo del láser y se pueden escribir de la siguiente forma para el caso de un par cualquiera de niveles  $|e\rangle$ ,  $|g\rangle$  conectados a través de una transición electromagnética dipolar [109]:

$$|1, n; \vec{r}\rangle = e^{i\phi(\vec{r})/2} \cos\theta(\vec{r})|e, n\rangle + e^{-i\phi(\vec{r})/2} \text{sen}\theta(\vec{r})|g, n+1\rangle, \quad (2.18)$$

$$|2, n; \vec{r}\rangle = -e^{i\phi(\vec{r})/2} \text{sen}\theta(\vec{r})|e, n\rangle + e^{-i\phi(\vec{r})/2} \cos\theta(\vec{r})|g, n+1\rangle. \quad (2.19)$$

Aquí  $\phi(\vec{r})$  es una fase y el ángulo  $\theta$  está definido como:

$$\cos 2\theta(\vec{r}) = -\delta/\delta'(\vec{r}), \quad \text{sen} 2\theta(\vec{r}) = \Omega/\delta'(\vec{r}). \quad (2.20)$$

En la expresión anterior  $\delta$  denota el desintonamiento entre la frecuencia del láser  $\omega_L$  y la frecuencia del átomo  $\omega_0$ ,  $\delta = \omega_L - \omega_0$ ;  $\Omega$  es la frecuencia de acoplamiento del sistema y es conocida como la frecuencia de Rabi, y  $\delta'(\vec{r})$  es un desintonamiento que depende de la posición  $\vec{r}$  y que surge por el acoplamiento del láser con el átomo, este es un desdoblamiento entre el estado base del átomo con  $n$  fotones y el estado excitado que tiene un fotón menos. La interacción causa que dos estados vestidos se repelan energéticamente entre sí, y para  $|\delta'|$  grandes la distancia entre estos aumenta una cantidad de  $\Omega^2/2|\delta'|$ ; siendo la magnitud del corrimiento de luz la mitad de esa cantidad.

Las probabilidades de transición dependen del tipo de polarización del campo de láser, por lo que la existencia de los gradientes de polarización implica que las probabilidades de transición sean dependientes de la posición, así como los desplazamientos Stark de la energía; para los estados base  $g_{\pm}$  estos últimos están dados por:

$$V^{\pm}(z) = V_0(-2 \pm \text{sen}2kz), \quad (2.21)$$

Por lo que cuando el estado vestido  $g_+$  tiene un máximo de energía, el estado vestido  $g_-$  tiene un mínimo.

Para ilustrar como estos elementos constituyen el enfriamiento Sísifo, se considerará un átomo que se desplaza en el eje  $z$ , el cual se encuentra en una posición donde la polarización es  $\sigma_+$ , en este caso si el estado inicial del átomo es el estado base  $g_+$ , este solo se puede acoplar al estado excitado  $|3/2 \ 3/2\rangle$ , el cual sólo puede decaer al estado  $g_+$ , ver el diagrama de la probabilidad de la transición de la Figura 2.5.b. Mientras que si se considera el estado  $g_-$  este se puede acoplar con el estado  $|3/2 \ -1/2\rangle$ ; el cual puede decaer ya sea al estado  $g_+$  o al estado  $g_-$ , siendo la transición más probable un decaimiento espontáneo al estado base  $g_+$ . Por lo que hay un bombeo óptico de átomos del estado base  $g_-$  al estado  $g_+$ , que en ese punto tiene una energía más baja que  $g_-$ . Lo mismo sucede en el caso de polarización  $\sigma_-$ , los átomos se bombean del estado  $g_+$  a  $g_-$ ; por lo que las transiciones atómicas transfieren átomos de la cima de la colina a un valle energético. El átomo seguirá “subiendo”y “bajando”las colinas del valle del potencial como se ilustra en la secuencia indicada en la Figura 2.5.c.

Este mecanismo induce que el átomo se enfríe, pues éste se mueve subiendo la colina del potencial, llega a la cima, donde la energía cinética se transforma en energía potencial, y por medio del bombeo óptico es transferido al estado base donde hay un mínimo de la energía, que corresponde a un valle energético. La energía potencial se disipa cuando en el decaimiento, el átomo emite un fotón. Como el átomo se encuentra en el valle empieza nuevamente a subir la colina del potencial repitiéndose el proceso descrito anteriormente, Figura 2.5.c. En este proceso, al haber disipación, se puede hablar de una fuerza de fricción.

$$\vec{F} = -\alpha'\vec{v}, \quad (2.22)$$

donde  $\alpha'$  es el coeficiente de fricción. El valor máximo de la fuerza de fricción aparece

cuando el átomo tiene una velocidad del orden de  $v\tau_p \sim \frac{\lambda}{4}$ , es decir, cuando:

$$kv \sim \Gamma', \quad (2.23)$$

Para este valor de la velocidad  $v$ , la energía disipada durante un tiempo  $\tau_p$  es del orden de  $\hbar\delta'$ , con  $\delta'$  igual a la diferencia de frecuencias entre los niveles de los estados. El coeficiente de fricción en este caso es:  $\alpha' \sim -\hbar k^2 \frac{\Delta'}{\Gamma'}$

Este modelo funciona para intensidades bajas del láser. En este límite  $\delta'$  y  $\Gamma'$  son proporcionales a la intensidad. Por lo tanto, en este regimen, el coeficiente de fricción para el enfriamiento Sísifo es independiente de la potencia del láser. Este enfriamiento lleva el nombre de Sísifo porque en la mitología griega Sísifo era un personaje condenado a empujar una roca a través de una colina, cada vez que llegaba a la cima, la roca rodaba hacia abajo, por lo que Sísifo debía de comenzar de nuevo su tarea.

### 2.2.2 Enfriamiento evaporativo.

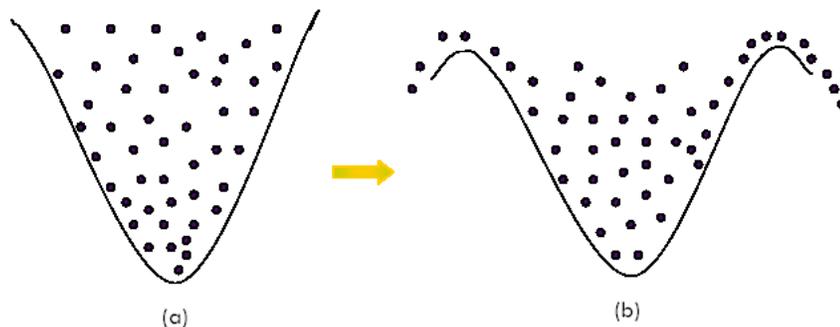
En los años de 1924-25, Bose y Einstein habían predicho que para suficientemente bajas temperaturas y altas densidades, un gas de átomos sufre una transición de fase al condensado de Bose-Einstein. Específicamente, esta fase requiere que la longitud de onda de de Broglie de los átomos sea comparable con su separación promedio. Con el descubrimiento de las técnicas de enfriamiento arriba mencionadas, a finales de los años 80, se creía que se podía obtener el condensado directamente: el enfriamiento láser permite obtener temperaturas del orden de  $\mu K$  con pérdidas pequeñas de átomos, siendo posible incrementar la densidad de la muestra [3]. Sin embargo, si esta densidad es muy grande, la luz dispersada por un átomo es absorbida por los otros causando una repulsión entre éstos. Además se produce un incremento de la tasa de colisión, por lo que no se puede incrementar la densidad lo suficiente como para obtener el condensado.

En 1986 Harald Hess sugirió el enfriamiento evaporativo como una forma eficiente para enfriar átomos atrapados enfocándose a átomos de hidrógeno lo cual resultó más complicado de lo esperado. En 1994 se extendió la técnica a átomos alcalinos combinando el enfriamiento evaporativo con el láser, lo que resultó como una técnica eficiente para poder obtener el condensado de Bose-Einstein en 1995 en gases diluidos de Rb (JILA), Na(MIT) y Li (RICE). Por este descubrimiento en 2001 se dio el premio nobel a Cornell, Wieman y Ketterle.

El método del enfriamiento evaporativo trabaja de manera similar a como se enfría una taza de café, al soplar a la taza removemos las partículas más energéticas del café, posteriormente éste se termaliza (queda en equilibrio) pero a una temperatura menor, y repitiendo este proceso se enfría el café. Con el enfriamiento evaporativo se remueven los átomos más calientes que poseen una distribución de velocidades a una temperatura  $T_1$ , después de termalizarse por medio de colisiones elásticas se llega a un equilibrio térmico a una temperatura  $T_2$ , siendo  $T_2 < T_1$ . Repitiendo este proceso se pueden enfriar a los

átomos; esta técnica se utilizó para conseguir la condensación de Bose-Einstein, y se han logrado conseguir temperaturas de ordenes de  $nK$  [6–8].

Para realizar el enfriamiento evaporativo los átomos están confinados y previamente enfriados por medio de alguna técnica óptica. Buscando que los átomos que tienen mayor velocidad abandonen al sistema se disminuye la altura del potencial que los confina. Campos de radio frecuencia transfieren solo a los átomos más veloces a un estado en el cual ya no estén confinados de tal forma que abandonan la trampa, como lo muestra la Figura 2.6. Para continuar con el proceso de enfriamiento se va disminuyendo la altura de la trampa y la anchura de la nube atómica, por lo que se obtienen muestras atómicas densas y temperaturas de nano-Kelvins. El requisito principal del enfriamiento evaporativo es que el tiempo de termalización de la nube de átomos sea pequeño comparado con el tiempo de vida media. Las colisiones elásticas conocidas como “colisiones buenas” son necesarias para el enfriamiento evaporativo. De hecho, una limitante del enfriamiento evaporativo está definida por la razón entre colisiones “buenas” y colisiones “malas”, que son las colisiones inelásticas.



**Figura 2.6:** En la figura se muestra el enfriamiento evaporativo, a) Los átomos se encuentran en la trampa, b) Se disminuye la altura del potencial para que los átomos más energéticos escapen de la trampa y así se enfrían los demás átomos.

El enfriamiento evaporativo es una técnica muy eficaz para bosones, pero no para fermiones. El enfriamiento evaporativo trabaja eficientemente con partículas que chocan unas con otras frecuentemente ya que cuando las partículas colisionan entre ellas, su energía se redistribuye en un proceso de termalización. En el caso de los bosones, estos presentan colisiones a bajas temperaturas, pero los fermiones de la misma especie no, debido al principio de exclusión. Sin embargo, si contamos con fermiones en diferentes estados internos o se utilizan mezclas de fermiones y bosones, habrá colisiones que permiten redistribuir la energía una vez que las partículas más energéticas escapan de la trampa. A este método donde se utilizan mezclas de bosones y fermiones se le conoce como enfriamiento simpático<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>en inglés sympathetic cooling

## 2.3 Historia y descripción de los experimentos en los gases de Fermi.

Desde que se han implementado las técnicas que permiten confinar y enfriar los átomos de Bose o de Fermi, se han podido realizar muchos experimentos que involucran desde crear el condensado de Bose Einstein [1] y el gas degenerado de Fermi [2], hasta experimentos donde se realiza el cruce de un gas de Fermi a un condensado, o se estudian propiedades de los gases ultrafríos. En esta sección se hará una breve reseña de los principales experimentos, enfocados al gas de Fermi. Es difícil mencionar todos los avances experimentales que se han llevado a cabo, por lo cual sólo se mencionarán los experimentos que de alguna forma han marcado la física de los gases de Fermi; una descripción más amplia se puede encontrar en [94] y [112]. A lo largo de las últimas dos décadas se han formado alrededor de 100 grupos experimentales que realizan experimentos enfocados a los gases de Fermi, una selección de estos grupos se muestra al final de esta sección.

En los últimos años se han realizado varios experimentos que involucran el condensado de Bose-Einstein (BEC), el cual se ha producido en átomos de Rb, Na, Li, H, K, Cs, Yb, Cr, y moléculas diatómicas homonucleares. Las investigaciones en el condensado han impactado muchas áreas de la física desde materia condensada hasta información cuántica.

Después de la realización de la condensación de Bose-Einstein, se empezaron a realizar experimentos en los gases de Fermi. En 1997, se empezaron a realizar en JILA usando  $^{40}\text{K}$  por Deborah Jin, y en Paris, usando  $^6\text{Li}$  por Christophe Salomon. Aprovecharon las técnicas que se habían empleado en la realización del condensado de Bose-Einstein, como son el atrapamiento magnético, el enfriamiento evaporativo y el enfriamiento simpatético, atrapamiento óptico y las resonancias de Feshbach.

El primer gas degenerado de Fermi fue creado en 1999 por B. DeMarco y D. Jin en JILA usando  $^{40}\text{K}$  [2]. Para esto, explotaron la estructura hiperfina del potasio, el cual permite el atrapamiento magnético de dos estados hiperfinos, obteniendo una ventaja experimental para el enfriamiento simpatético. Al final de 2003, seis grupos habían tenido éxito al producir gases degenerados de Fermi. En 2002, el grupo de M. Inguscio en Florencia usando también  $^{40}\text{K}$  [113], mientras que los otros cinco grupos usaron  $^6\text{Li}$ : El grupo de Hulet en Rice [75], el grupo de Salomon en ENS Paris [114], el grupo de Thomas en Duke [115] y el grupo de Ketterle en MIT [116] en 2001, y el grupo de Grimm en Innsbruck en 2003 [13].

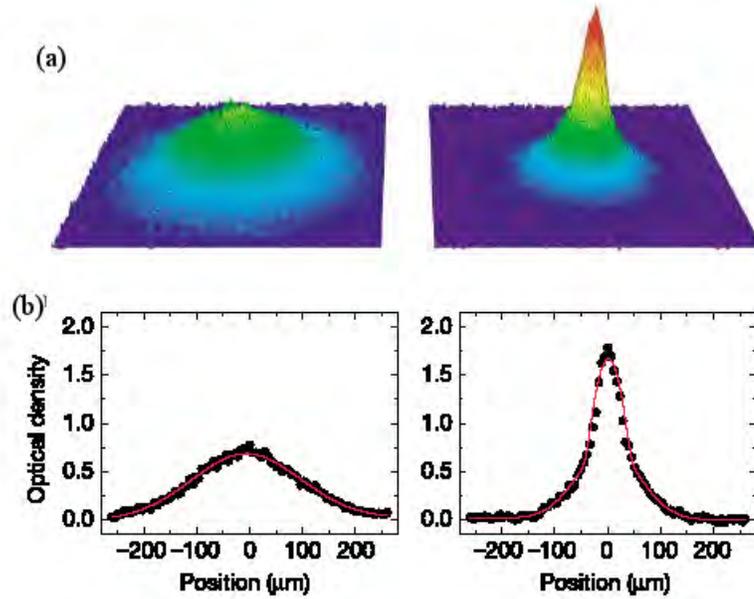
Para poder estudiar el gas de Fermi y Bose, que son gases cuyas componentes interactúan resulta muy conveniente utilizar las resonancias de Feshbach, descritas en el Capítulo anterior. Entre 2001 y 2002, varios grupos pudieron confinar ópticamente una mezcla de átomos fermiónicos de dos componentes y entonar un campo magnético hasta obtener las resonancias de Feshbach [117–120]. El siguiente año, 2003, se volvió el año de las moléculas de Feshbach, estas son moléculas creadas a partir de un gas de átomos fermiónicos alrede-

dor de la resonancia de Feshbach [91]. Dichas moléculas tienen una vida media larga, grandes dimensiones y se pueden enfriar para poder formar un condensado molecular de Bose-Einstein [15, 22, 92, 121]. En noviembre de ese año, tres grupos reportaron la realización de un condensado de moléculas [12–14]. Del experimento de  $^{40}\text{K}$  [12], se reportó la observación directa de un condensado de Bose-Einstein molecular creado a partir de ajustar la interacción entre partículas por medio de un campo magnético, en un gas de átomos de Fermi ultrafríos. Empezaron con un gas de Fermi que se enfrió mediante el método de enfriamiento evaporativo hasta obtener un alto grado de degeneración, y adiabáticamente crearon moléculas al entonar el campo magnético a través de la resonancia de Feshbach. Si la temperatura  $T$  del gas es suficientemente baja, menor que la temperatura de Fermi  $T_F$ , se obtendrá una muestra molecular que presente una fracción de condensado molecular significativa. En la figura 2.7 de la referencia [12] se muestra una comparación entre la distribución experimental que obtuvieron para un experimento donde la temperatura inicial era  $0.06T_F$ , y otra donde la temperatura inicial era  $0.19T_F$ . La distribución de momento es una muestra que la nube de moléculas ligadas débilmente sufrió una transición de fase a un condensado BEC.

En el experimento realizado en Innsbruck [13] reportaron un condensado de Bose-Einstein de más de  $10^5$  moléculas de  $\text{Li}_2$  en una trampa óptica, los cuales se crearon a partir de una mezcla de átomos de litio fermiónicos. Durante el proceso de enfriamiento evaporativo las moléculas se formaron por recombinación de tres cuerpos cerca de una resonancia de Feshbach y finalmente condensaron en un estado de equilibrio térmico de vida media larga. El condensado de moléculas débilmente ligadas apareció cuando hicieron el enfriamiento evaporativo a longitudes de dispersión positivas grandes  $\alpha \sim +3500a_0$ ,  $a_0$  es el radio de Bohr. En este experimento, obtuvieron la evidencia del condensado de forma indirecta, a partir del número de partículas en una trampa poco profunda y de la dependencia del campo magnético. Una observación directa se realizó poco después [18], donde pudieron hacer una conversión reversible de un condensado molecular de  $^6\text{Li}_2$  a un gas de Fermi de átomos por medio de una resonancia de Feshbach. Usaron imágenes ópticas *in situ*, observaron un ligero cambio del tamaño de la nube en la región del cruce. En la resonancia de Feshbach, el gas interactúa fuertemente y el tamaño de la nube medida es (75(7)%) el tamaño de un gas de Fermi a temperatura cero.

En el MIT [8], observaron un condensado de Bose-Einstein de moléculas al utilizar el enfriamiento evaporativo en una mezcla de dos estados diferentes de spin en un gas de Fermi de  $^6\text{Li}$  confinado por medio de una trampa dipolar óptica cerca de una resonancia de Feshbach; el gas atómico se convirtió en moléculas de  $^6\text{Li}_2$ . Para temperaturas menores que  $600nK$ , se identificó un condensado de Bose-Einstein formado por 900 000 moléculas, debido a la aparición súbita de la distribución de densidad.

En estos experimentos se realizan cruces de condensados que consisten de moléculas grandes y extendidas a pares de fermiones. El régimen donde se realiza el cruce es aquel donde los átomos interactúan fuertemente,  $k_f\alpha > 1$ , y el tamaño de los pares no es tan



**Figura 2.7:** Imágenes de una nube molecular. (a) Gráfica de superficie de la densidad de una muestra molecular creada al entonar un campo magnético en un gas atómico de fermiones, la temperatura inicial es de  $0.19T_F$  ( $0.06T_F$ ), para la imagen de la derecha (izquierda). La imagen de la derecha muestra la temperatura más baja de los átomos fermiónicos, entonaron el campo a través de la resonancia de Feshbach desde  $B = 202.78G$  hasta  $201.54G$  en  $10ms$ , tiempo en el cual las moléculas formaron un condensado. El número total de moléculas fue de 470 000 (200000) para la imagen de la izquierda (derecha). (b) Secciones transversales, los puntos corresponden a los parámetros de las imágenes de arriba y las líneas a ajustes de superficie. Los ajustes muestran en la imagen de la derecha que no hay fracción condensada a una temperatura  $T = 250nK = 0.90T_c$ , mientras que en la gráfica de la izquierda se muestra una fracción condensada del 12% a una temperatura de  $T = 79nK = 0.49T_c$ . Imagen tomada de Nature **426** 537 (2003).

pequeño comparado con la distancia entre los átomos  $\sim 1/k_f$ . En 2004, el grupo de D. Jin [122] y el de W. Ketterle [19] observaron pares de condensados en el régimen donde los gases de Fermi interactúan fuertemente y la interacción es resonante, pasado a la región BEC de la resonancia de Feshbach.

A partir de 2003, los experimentos empezaron a explorar el cruce a partir de un condensado molecular (BEC) hasta un estado superfluido fermiónico con un tipo de apareamiento BCS<sup>5</sup>. Diversos grupos experimentales estudiaron propiedades del gas de Fermi en el cruce BEC-BCS. En el grupo de la Universidad de Duke y en el de Innsbruck, se realizaron experimentos con excitaciones colectivas donde mostraron evidencia de superfluidez en el gas que interactúa fuertemente. Cabe resaltar que en el grupo de R. Grimm [123], el trabajo de oscilaciones colectivas mostró un rompimiento notable del comportamiento hidrodinámico

<sup>5</sup>siglas de Bardeen-Cooper-Schrieffer

del gas cuando la fuerza de la interacción cambió, sugiriendo una transición de un gas superfluido a uno normal.

La espectroscopía para observar el apareamiento entre fermiones basada en el método de radio frecuencia, RF, mostró la brecha de apareamiento<sup>6</sup> a través de todo el cruce BEC-BCS, la cual revela la formación de pares. También, el grupo de la Universidad de Duke realizó experimentos donde se mide la capacidad calorífica de un gas de Fermi interactuante que a su vez muestra una transición de fase en la temperatura donde se espera la superfluidéz. A pesar de que todos estos estudios eran consistentes con el comportamiento de un superfluido, no presentaban propiedades únicas de superfluidos, como lo es la formación de vórtices. Finalmente en abril de 2005, se demostró directamente la superfluidéz fermiónica y la coherencia de fase en el MIT a través de la observación de vórtices y arreglos de vórtices en un gas de Fermi que interactúa fuertemente [29]. Otros experimentos que cabe destacar desde el 2006 incluyen el estudio de mezclas no balanceadas de fermiones realizadas por los grupos de Ketterle y Hulet, la observación (indirecta) de superfluidéz en fermiones en una red óptica, la medida de la velocidad del sonido y la medida de velocidades críticas. Otros experimentos se enfocan en la física de dos cuerpos, la cual incluye la formación de moléculas en onda- $p$ .

Como se mencionó al principio de la presente sección, es difícil resumir y citar todos los artículos experimentales sobre los gases degenerados de Fermi y sus propiedades, una mayor descripción de los grupos experimentales se encuentra en la siguiente página de internet: <http://ucan.physics.utoronto.ca/Groups>. De estos grupos sólo mencionaré algunos experimentos que han marcado la física de los gases ultrafríos los cuales se muestran a continuación con la correspondiente página de internet y el líder del grupo.

- Grupo de W. Ketterle. Instituto: MIT, Cambridge. Realizan experimentos en gases degenerados de Fermi: Mezclas de Bose-Fermi, determinación de tamaño de un par fermionico en un superfluido interactuante, estudios de superfluidéz, vórtices en BEC, entre otros. Página del grupo: [http://cua.mit.edu/ketterle\\_group/](http://cua.mit.edu/ketterle_group/)
- Grupo D. Jin. Instituto: JILA, Boulder. Estudian moléculas ultrafrías polares, espectroscopía en el momento, dispersión de Bragg en un condensado de Bose-Einstein fuertemente interactuante, moléculas de Feshbach heteronucleares y moléculas de Feshbach en onda- $p$ . Página del grupo: <http://jilawww.colorado.edu/jin/index.html>
- Grupo de M. Inguscio. Instituto: LENS (European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy). Estudian mezclas heteronucleares de condensados, mezclas degeneradas y el control de interacciones interatómicas en presencia de una red óptica tridimensional. Página del grupo: <http://quantumgases.lens.unifi.it/?q=node/85>
- Grupo de R. G. Hulet. Instituto: Rice, Houston. Investigan átomos a temperaturas de unos pocos nanokelvin. Estudian colisiones atómicas ultrafrías, el conden-

---

<sup>6</sup>en inglés pairing gap

sado de Bose-Einstein y el apareamiento en gases de Fermi. Página del grupo: <http://atomcool.rice.edu/>

- Grupo de C. Salomon y Cohen-Tannoudji. Instituto: ENS Paris. Realizan experimentos en el condensado de Bose-Einstein y aplicaciones. Experimentos en gases degenerados de Fermi usando  $^6\text{Li}$  y mezclas de fermiones. Página del grupo: <http://www.lkb.ens.fr/recherche/atfroids/welcome.html>
- Grupo de J. E. Thomas. Instituto Duke. Estudian gases de Fermi ultrafríos. Usan trampas ópticas para obtener la degeneración cuántica. Miden propiedades termodinámicas del gas. Página del grupo: <http://www.phy.duke.edu/research/photon/qoptics>
- Grupo de R. Grimm. Instituto: Innsbruck. Estudian mezclas de moléculas de Rb-Cs. Propiedades de las colisiones cerca de Resonancias de Feschbach. Interacciones en un gas de  $^6\text{Li}$ . Página del grupo: <http://www.uibk.ac.at/exphys/ultracold/>



## Termodinámica del gas de Fermi ideal.

En un gas ultrafrío diluído se puede dar el caso en el que las interacciones entre las partículas del gas pueden ser despreciables; en este caso el gas se puede considerar como un gas ideal. Un ejemplo de este caso es el de un gas de Fermi en el cual todos los átomos son de la misma especie y las interacciones se anulan aproximadamente a bajas temperaturas debido al principio de exclusión de Pauli, y las interacciones se pueden tratar como una pequeña perturbación. Debido a esto, el gas ideal de Fermi es un primer paso para estudiar la física de los gases de Fermi diluidos.

En esta sección se presenta la termodinámica de los gases de Fermi ideales, en el sentido que no hay interacción entre las partículas. Se analizan dos casos, cuando el potencial externo es el de una caja de paredes impenetrables de volumen  $V$ , y cuando el potencial externo es un potencial armónico. En la última sección de este capítulo se presentan las diferencias que ocurren debido al potencial de confinamiento.

### 3.1 Gas de Fermi ideal confinado en una caja de volumen $V$ .

Consideremos un sistema de un gas de Fermi no interactuante, que tiene sólo una sola componente de espín, el cual se encuentra en equilibrio térmico [83]. Las propiedades de este gas se estudian en el régimen que se le conoce como gas degenerado de Fermi, que corresponde al límite donde  $\rho\lambda_B^3 \sim 1$ , donde  $\rho$  es la densidad del gas y  $\lambda_B$  es la longitud de onda de de Broglie definida como:

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}}, \quad (3.1)$$

$h$  es la constante de Planck,  $k_B$  la constante de Boltzmann, y  $T$  la temperatura.

El hamiltoniano de un sistema de  $N$  partículas sin interacción es la suma de términos de un solo cuerpo [124–126]:

$$H = \sum_{\iota=1}^N h_{\iota}; \quad (3.2)$$

el hamiltoniano de cada partícula es:

$$h_{\iota} = \frac{p_{\iota}^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}_{\iota}). \quad (3.3)$$

$V_{ext}(\vec{r}_{\iota})$  es el potencial externo que confina a las partículas. Como las partículas son fermiones y se utiliza el ensemble gran canónico para describir al sistema, el gran potencial es:

$$\Omega_F = -k_B T \sum_m \ln(1 + e^{\alpha - \beta \epsilon_m}). \quad (3.4)$$

donde  $\alpha = \mu\beta$ ,  $\mu$  el potencial químico,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\epsilon_m$  las energías accesibles a cada partícula en el estado  $n$ .

En el caso tridimensional, donde el potencial externo que se considera es una caja de volumen  $V$ , se puede reemplazar la suma de la ecuación (3.4) por una integral sobre la energía, utilizando la correspondiente densidad de estados  $g(\epsilon)$ :

$$\Omega = -k_B T \int_0^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) \ln(1 + e^{\alpha - \beta \epsilon}), \quad g(\epsilon) = \frac{g_s 2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2}, \quad (3.5)$$

$g_s$  es la degeneración interna de cada partícula, por ejemplo, si es degeneración de espín  $g_s = 2s + 1$ . Haciendo el cambio de variable  $x = \beta \epsilon$  y  $z = e^{\mu/k_B T} = e^{\alpha}$  en la ecuación (3.5):

$$\Omega = -g_s k_B T \frac{V}{\lambda_B^3} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})} \int_0^{\infty} dx x^{1/2} \ln(1 + z e^{-x}), \quad (3.6)$$

e integrando por partes

$$\Omega = -g_s k_B T \frac{V}{\lambda_B^3} \frac{1}{\frac{3}{2}\Gamma(\frac{3}{2})} \int_0^{\infty} \frac{dx x^{3/2}}{z^{-1} e^x + 1}, \quad (3.7)$$

que en términos de las funciones de Fermi

$$f_n(z) = f(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} e^x + 1}, \quad (3.8)$$

se escribe como:

$$\Omega = -g_s k_B T \frac{V}{\lambda_B^3} f_{\frac{3}{2}}(z). \quad (3.9)$$

Las funciones de Fermi satisfacen la siguiente igualdad:

$$\frac{\partial}{\partial z} f_n(z) = \frac{1}{z} f_{n-1}(z), \quad (3.10)$$

que junto con las relaciones de Euler nos permiten encontrar la presión,  $\Omega = -pV$ , el número  $N$  de partículas y la entropía  $S$ :

$$p = g_s \frac{k_B T}{\lambda_B^3} f_{\frac{5}{2}}(z). \quad (3.11)$$

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} = g_s \frac{V}{\lambda_B^3} f_{\frac{3}{2}}(z). \quad (3.12)$$

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right)_{T,V} = g_s k_B \frac{V}{\lambda_B^3} \left[ \frac{5}{2} f_{\frac{5}{2}}(z) - \frac{\mu}{k_B T} f_{\frac{3}{2}}(z) \right]. \quad (3.13)$$

Además la expresión para la energía promedio es:

$$\bar{E} = \int \epsilon n(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon = \frac{3}{2} g_s \frac{V k_B T}{\lambda_B^3} f_{\frac{5}{2}}(z), \quad (3.14)$$

la cual se puede expresar como función del número de partículas y de la temperatura:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{\frac{5}{2}}(z)}{f_{\frac{3}{2}}(z)}, \quad (3.15)$$

o como función de la presión y el volumen:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} p V. \quad (3.16)$$

Una propiedad de este sistema es el calor específico a volumen constante, el cual se calcula a partir de la ecuación (3.15):

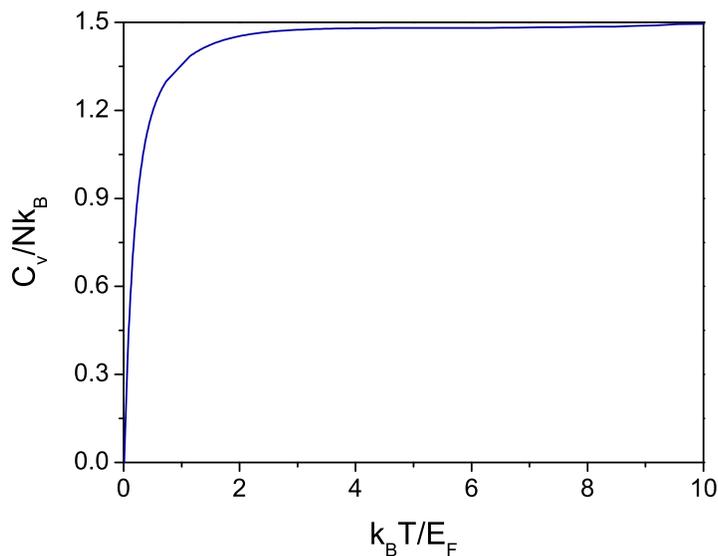
$$C_v = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial}{\partial T} \left[ \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{\frac{5}{2}}(z)}{f_{\frac{3}{2}}(z)} \right]\right)_V. \quad (3.17)$$

Utilizando la regla de la cadena y la propiedad (3.10) de las funciones de Fermi:

$$C_v = \frac{15}{4} N k_B \frac{f_{\frac{5}{2}}(z)}{f_{\frac{3}{2}}(z)} - \frac{9}{4} N k_B \frac{f_{\frac{3}{2}}(z)}{f_{\frac{1}{2}}(z)}. \quad (3.18)$$

En la Figura 3.1 se indica el comportamiento del calor específico como función de la temperatura de acuerdo a la ecuación Ec. (3.18).

En el caso de que el gas de Fermi se encuentre a temperatura cero,  $T = 0$ , la función de distribución de Fermi Dirac es una función escalón, como se muestra en la Figura 3.2. El número de partículas se calcula tomando en cuenta la forma de la distribución:



**Figura 3.1:** Calor específico en el caso del gas de Fermi en una caja de volumen  $V$ .

$$N = \int \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = \frac{g_s 2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} = g_s V \left( \frac{2\pi m}{h^2} \right)^{3/2} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} E_F^{3/2}. \quad (3.19)$$

A partir de la expresión para el número de partículas a temperatura cero, se puede conocer la energía de Fermi la cual es igual al potencial químico a  $T = 0$ ,  $E_F = \mu(T = 0)$ .

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2 N}{g_s V} \right)^{2/3}. \quad (3.20)$$

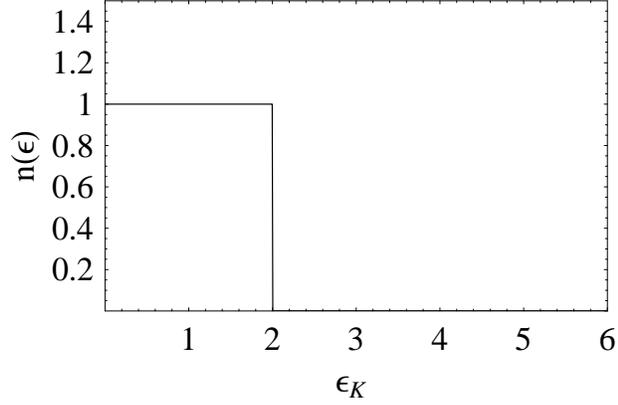
La energía de Fermi, define una temperatura característica del gas degenerado de Fermi, conocida como temperatura de Fermi,  $T_F$ :

$$T_F = \frac{1}{k_B} \frac{2\pi\hbar^2}{2m} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} \left( \frac{3}{4\pi g_s} \right)^{2/3}. \quad (3.21)$$

La energía promedio se puede escribir en términos de la energía de Fermi de la siguiente manera:

$$\bar{E} = \frac{3}{5} N E_F. \quad (3.22)$$

En el caso de temperatura cero, el término  $\frac{\mu}{k_B T} \rightarrow \infty$  diverge, la fugacidad definida como  $z = e^{\frac{\mu}{k_B T}}$  es grande ( $z \gg 1$ ) y las funciones de Fermi  $f_n(z)$  se aproximan como:



**Figura 3.2:** Distribución de Fermi Dirac a temperatura cero.

$$f_n(z) = \frac{(\ln z)^n}{\Gamma(n+1)} \left[ 1 + \pi^2 \frac{5}{2} \left( \frac{3}{2} \right) \frac{1}{6} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right]. \quad (3.23)$$

Sustituyendo esta aproximación hasta primer orden en  $z$ , en las ecuaciones (3.11), (3.12) y (3.13); y utilizando que  $\ln z = \frac{\mu}{k_B T}$  se obtiene:

$$N(T=0, \mu) = g_s \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi\mu}{h^2} \right)^{3/2} V. \quad (3.24)$$

$$p(T=0, \mu) = g_s \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi\mu}{h^2} \right)^{3/2} \mu. \quad (3.25)$$

$$S(T=0, \mu) = g_s k_B V \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi\mu}{h^2} \right)^{3/2} \frac{k_B T}{\mu} \frac{\pi^2}{2}. \quad (3.26)$$

El calor específico se calcula utilizando la siguiente relación:

$$C_v(T) = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{N,V} = g_s k_B V \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left( \frac{2m\pi\mu}{h^2} \right)^{3/2} \frac{k_B T}{\mu} \frac{\pi^2}{2}. \quad (3.27)$$

A bajas temperaturas  $T \ll T_F$  el calor específico es:

$$\frac{C_v}{Nk_B} = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{E_F} \quad T \ll T_F. \quad (3.28)$$

De la ecuación anterior, podemos concluir que en este límite, el calor específico depende linealmente de la temperatura.

Para calcular el valor del potencial químico en el límite bajas temperaturas ( $k_B T \ll E_F$ ) se utiliza la expansión de Sommerfeld [127], obteniendo:

$$\mu = E_f - \frac{\pi^2(k_B T)^2}{6} \frac{1}{g(E_F)} \left( \frac{dg(\epsilon)}{d\epsilon} \right)_{E_F}. \quad (3.29)$$

Utilizando la densidad de estados correspondiente se obtiene:

$$\mu(T, N) \sim E_f \left[ 1 - \frac{1}{3} \left( \frac{\pi k_B T}{2E_F} \right)^2 \right]. \quad (3.30)$$

En el caso de altas temperaturas ( $k_B T \gg E_F$ ), las funciones de Fermi se aproximan a una serie, ya que  $z^{-1} = e^{-\alpha} \rightarrow \infty$ , dicha serie es:

$$f_n(z) = z - \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} + \dots \quad (3.31)$$

Sustituyendo la serie anterior a primer orden en la ecuación Ec. (3.12), se obtiene:

$$N = g_s \frac{V}{\lambda_B^3} f_{\frac{3}{2}}(z) = g_s \frac{V}{\lambda_B^3} (z) = g_s \frac{V}{\lambda_B^3} e^{\mu/k_B T}. \quad (3.32)$$

En la ecuación anterior se tiene al número de partículas como función del potencial químico y de la temperatura, por lo que se puede despejar el potencial químico en términos de la temperatura y de la energía de Fermi obteniendo:

$$\mu(T, N) \sim -k_B T \ln \left[ \frac{3\pi^{1/2}}{4} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^{3/2} \right]. \quad (3.33)$$

En la Figura 3.3, se muestra el comportamiento del potencial químico en el caso de altas y bajas temperaturas.

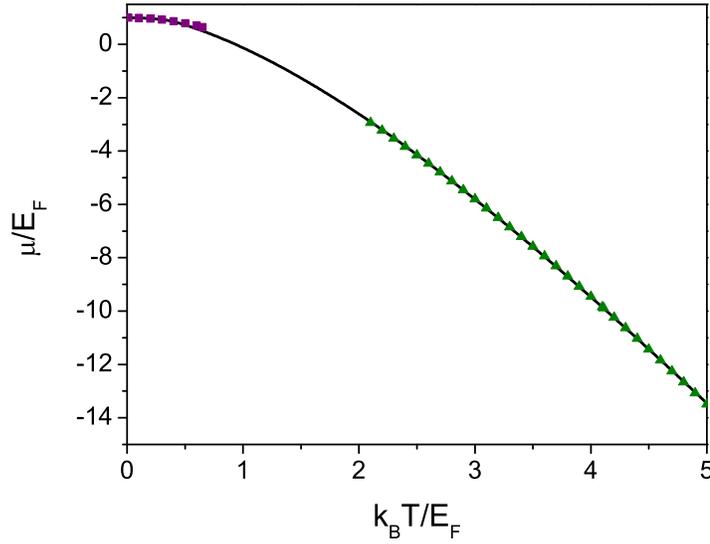
Para calcular el calor específico a altas temperaturas ( $k_B T \gg E_F$ ), el llamado límite clásico; primero se aproxima la energía promedio mediante la serie (3.31) siendo:

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{\frac{5}{2}}(z)}{f_{\frac{3}{2}}(z)} = \frac{3}{2} N k_B T \frac{z}{z} = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (3.34)$$

El calor específico a volumen constante en el límite de altas temperaturas tiene la siguiente expresión:

$$C_v \sim \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = \left( \frac{\partial}{\partial T} \left[ \frac{3}{2} N k_B T \right] \right)_V = \frac{3}{2} N k_B, \quad (3.35)$$

de la cual se observa que el calor específico a altas temperaturas es independiente de la temperatura y tiende a un valor constante.



**Figura 3.3:** Potencial químico para el gas de Fermi confinado en una caja. La línea sólida indica el potencial químico a cualquier temperatura. Los cuadros indican el potencial químico a bajas temperaturas y los triángulos indican el comportamiento a altas temperaturas.

### 3.2 Gas de Fermi confinado en una trampa armónica.

En la sección anterior se estudiaron las propiedades termodinámicas del gas ideal confinado en una caja, mostrando el comportamiento para el potencial químico y el calor específico en el límite de altas y bajas temperaturas. En esta sección se presenta un tratamiento análogo para un gas de Fermi confinado en una trampa armónica.

Para estudiar este sistema se consideran  $N$  fermiones de masa  $M$ , los cuales están atrapados por medio de un potencial armónico el cual tiene simetría azimutal [43].

El hamiltoniano que describe a este sistema se puede escribir como en el caso descrito en la sección anterior, Ec. (3.2), siendo que en este caso  $h_i$ , es:

$$h_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2M} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] + \frac{M\omega_r^2}{2} \rho^2. \quad (3.36)$$

Donde  $\tilde{\rho} = [x^2 + y^2 + \zeta z^2]^{1/2}$ ,  $\omega_r$  y  $\omega_z$ , ( $\omega_z = \zeta\omega_r$ ) son las frecuencias en la dirección radial y axial, respectivamente. El factor de asimetría de la trampa es  $\zeta$ , el cual indica la forma de la trampa, cuando  $\zeta = 1$  la trampa tiene simetría esférica. Los correspondientes eigenvalores son:

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = \hbar\omega_r \left( n_x + n_y + \zeta n_z + \frac{3}{2} \right); \quad (3.37)$$

$n_x, n_y, n_z$  son números enteros positivos.

En los experimentos las energías térmicas son mucho mayores que el espaciamiento entre los niveles de energía de atrapamiento, ( $k_B T \gg \hbar\omega$ ). Por lo que se utiliza la densidad de estados semiclásica,  $g(\epsilon)$ :

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi(2M)^{3/2}}{h^3} \int \sqrt{E - U(r)} d^3r = \frac{\epsilon^2}{2\zeta(\hbar\omega_r)^3}. \quad (3.38)$$

A temperatura cero, el potencial químico es la energía del último estado ocupado, que se conoce como la energía de Fermi,  $E_F = \mu$ , y el número de ocupación  $n(\epsilon)$  es igual a uno, para energías menores que la energía de Fermi y cero para energías mayores que la energía de Fermi, por lo que el número de partículas es:

$$N = \int \frac{g(\epsilon)d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = \int_0^{E_F} \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{\zeta(\hbar\omega_r)^3} = \frac{E_F^3}{6\zeta(\hbar\omega_r)^3}, \quad (3.39)$$

De la ecuación anterior podemos obtener la energía de Fermi, la cual es:

$$E_F = [6\zeta N(\hbar\omega_r)^3]^{1/3} = \hbar\omega_r(6\zeta N)^{1/3}; \quad (3.40)$$

ésta es la energía característica de la nube atómica.

Para encontrar el tamaño característico ( $R_F$ ) del gas degenerado de Fermi atrapado, se utiliza un tratamiento semiclásico, de una partícula con energía total  $E_F$  que se encuentra en un potencial armónico.

$$E_F = \frac{M\omega_r^2 R_F^2}{2}. \quad (3.41)$$

Por lo que:

$$R_F \equiv [2E_F/M\omega_r^2]^{1/2}. \quad (3.42)$$

Sustituyendo la energía de Fermi, se tiene que:

$$R_F \equiv \sigma_r(48N\zeta)^{1/6}; \quad (3.43)$$

$\sigma_r = (\hbar/M\omega_r)^{1/2}$  es el ancho radial del estado base de la trampa. Para valores de  $N$  grandes, el ancho de la nube degenerada de Fermi,  $R_F$ , es mucho mayor que el ancho radial  $\sigma_r$ , y la energía de Fermi es mucho mayor que los espaciamientos entre los niveles de la trampa.

Así como se define un radio característico, también se define un número de onda característico  $k_F$ , el cual está determinado por el momento de una partícula libre de energía  $E_F$ .

$$k_F = \frac{p_F}{\hbar} \quad \frac{p_F^2}{2M} = E_F. \quad (3.44)$$

De donde se obtiene una relación entre el  $k_F$  y el ancho radial  $\sigma_r$ :

$$k_F \equiv \frac{(2ME_F)^{1/2}}{\hbar} = \left[ \frac{(2ME_F)}{\hbar} \right]^{1/2} = \frac{1}{\sigma_r} (48\zeta N)^{1/6}, \quad (3.45)$$

utilizando que  $\sigma_r = \frac{R_F}{(48\zeta N)^{1/6}}$ , se escribe  $k_F$  en términos de  $R_F$ :

$$k_F = \left( \frac{48N\zeta}{R_F^3} \right)^{1/3}. \quad (3.46)$$

La ecuación Ec. (3.46) indica que el número de onda  $k_F$  es inversamente proporcional a la distancia entre las partículas de un gas.

Como los eigenestados del potencial armónico son conocidos, las propiedades termodinámicas del gas de Fermi se pueden obtener en principio sumando sobre el número de estados, pero en ciertos casos es necesario utilizar aproximaciones que sean válidas en el límite de  $N$  grandes, como en el tratamiento anterior. A continuación estudiaremos las propiedades del sistema en el espacio fase utilizando una aproximación semiclassical conocida como *aproximación de Thomas-Fermi*. En esta aproximación se supone que la densidad de energía del gas atrapado está localmente dada, es decir, depende de la posición de cada átomo del gas. El estado de cada átomo está determinado por una posición  $\vec{r}$  y un vector de onda  $\vec{k}$ , los cuales se pueden ver como los centros de un estado de un paquete de onda. La energía de la partícula es el correspondiente valor del hamiltoniano del sistema, se reemplazan las sumas sobre estados por integrales sobre el espacio fase de 6-dimensiones cuya densidad es  $(2\pi)^{-3}$ .

Siguiendo los resultados de la Ref. [43], se define un vector de onda local de Fermi  $k_F$  dado por:

$$\frac{\hbar^2 k_F(\vec{r})^2}{2M} + V(\vec{r}) = E_F. \quad (3.47)$$

Donde  $V(\vec{r})$  es el potencial de la trampa. La densidad  $n(\vec{r})$  es el volumen del mar de Fermi local en el espacio-k, multiplicada por la densidad de estados  $(2\pi)^{-3}$

$$n(\vec{r}; T = 0) = \frac{k_F(\vec{r})^3}{6\pi^2}. \quad (3.48)$$

Para  $\tilde{\rho} > R_F$ ,  $n(\vec{r}) = 0$ . Utilizando las ecuaciones (3.47) y (3.48) se obtiene la densidad  $n(\vec{r})$  para el caso  $\tilde{\rho} \leq R_F$

$$n(\vec{r}; T = 0) = \frac{N\zeta}{R_F^3} \frac{8}{\pi^2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\rho}^2}{R_F^2} \right]^{\frac{3}{2}}. \quad (3.49)$$

El número de partículas en términos de las funciones de Fermi es:

$$N = \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_r} \right)^3 \frac{1}{\zeta} f_3(z). \quad (3.50)$$

Y la energía promedio  $\bar{E}$  es:

$$\bar{E} = \int \epsilon n(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon = \left( \frac{k_B T}{\hbar \omega_r} \right)^3 \frac{3k_B T}{2\zeta} f_4(z), \quad (3.51)$$

que escrita como función del número de partículas y las funciones de Fermi resulta

$$\bar{E} = 3Nk_B T \frac{f_4(z)}{f_3(z)}. \quad (3.52)$$

Para calcular el calor específico a volumen constante, y número de partículas constante, hay que notar que no se tiene un volumen  $V$  definido sino que la frecuencia de la trampa determina la región del espacio que ocupa la nube de fermiones, por ello se calcula el calor específico a frecuencia y número de partículas constante.

$$C_v = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{N, \omega_r} = \left( \frac{\partial}{\partial T} \left[ 3Nk_B T \frac{f_4(z)}{f_3(z)} \right] \right)_{N, \omega_r}. \quad (3.53)$$

Utilizando la regla de la cadena, la ecuación Ec. (3.10) y la siguiente propiedad  $\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{3z}{T} \frac{f_3(z)}{f_2(z)}$ ; se obtiene el calor específico a frecuencia y número de partículas constante:

$$C_v = 12Nk_B \frac{f_4(z)}{f_3(z)} - 9Nk_B T \frac{f_3(z)}{f_2(z)}. \quad (3.54)$$

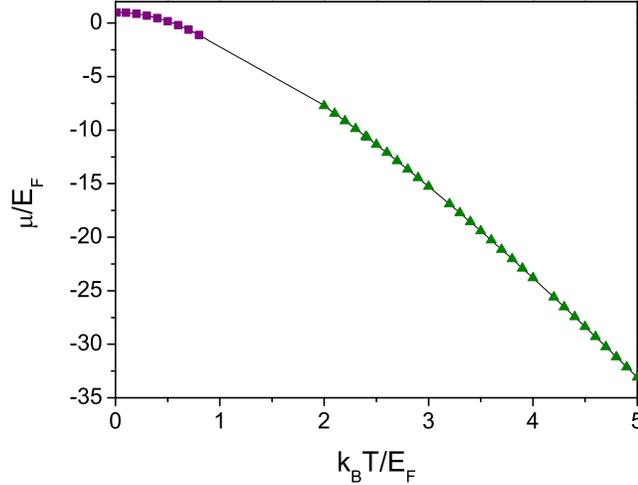
Para calcular el potencial químico a cualquier temperatura, se utilizan métodos numéricos en la ecuación  $N = \int \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$ . Analíticamente se pueden encontrar expresiones en los límites de altas temperaturas y de bajas temperaturas.

En el caso del límite de bajas temperaturas ( $k_B T \ll E_F$ ) se utiliza la expansión de Sommerfeld, como en la sección anterior, siendo el potencial químico en este límite:

$$\mu(T, N) \sim E_f \left[ 1 - \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (3.55)$$

En este límite se calcula también el calor específico a volumen y frecuencia constante, para calcular la energía promedio ( $\bar{E}$ ) se utiliza también la expansión de Sommerfeld, obteniendo.

$$\frac{C_v}{Nk_B} \sim \pi^2 \frac{k_B T}{E_F}. \quad (3.56)$$



**Figura 3.4:** Potencial químico para el gas de Fermi confinado en una trampa armónica. La línea sólida indica el potencial químico a cualquier temperatura. Los cuadros indican el potencial químico a bajas temperaturas y los triángulos indican el comportamiento a altas temperaturas.

En el caso del límite de altas temperaturas  $k_B T \gg E_F$ , se utiliza la aproximación en serie de las funciones de Fermi Ec. (3.31) como en la sección anterior en la ecuación del número de partículas, Ec. (3.50):

$$N = \frac{1}{2\zeta} \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega_r} \right)^3 \Gamma(3)z = \frac{1}{2\zeta} \left( \frac{k_B T}{\hbar\omega_r} \right)^3 \Gamma(3)[e^{\mu/k_B T}]. \quad (3.57)$$

A partir de esta expresión se puede despejar el potencial químico obteniendo:

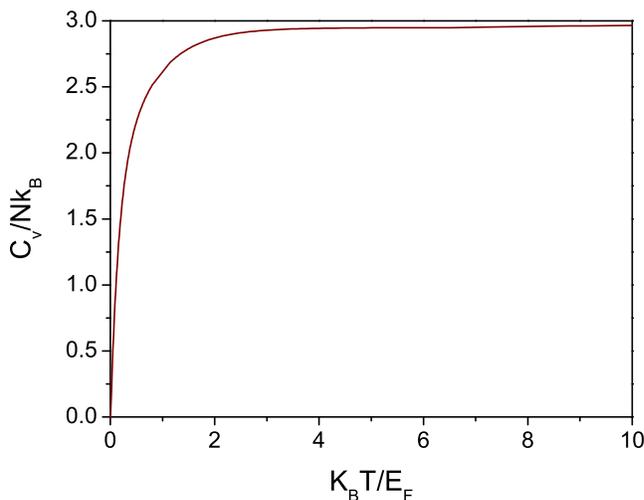
$$\mu(T, N) = -k_B T \ln \left[ 6 \left( \frac{k_B T}{E_F} \right)^3 \right]. \quad (3.58)$$

Para obtener el valor del calor específico se sustituye la ecuación Ec. (3.31) en la ecuación Ec. (3.52) para obtener la expresión de la energía promedio como función de la temperatura:

$$\bar{E} = 3Nk_B T. \quad (3.59)$$

Finalmente la expresión para el calor específico es:

$$C_v = \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{N, \omega_r} = 3Nk_B \quad (3.60)$$



**Figura 3.5:** Calor específico del gas en una trampa armónica.

En la Figura 3.4 se muestra el comportamiento del potencial químico a altas y bajas temperaturas, mientras que en la Figura 3.5 está el comportamiento del calor específico para cualquier temperatura.

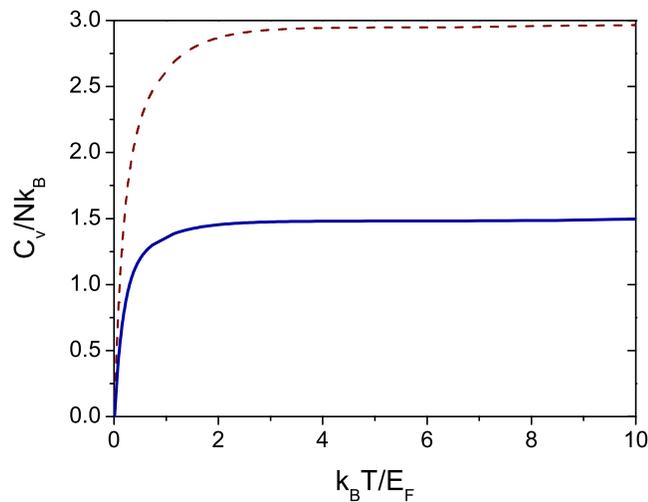
### 3.3 Consecuencias debidas al potencial de confinamiento externo.

Dependiendo del tipo de potencial de confinamiento las propiedades termodinámicas del gas ideal de Fermi cambian. Por ejemplo, en el caso del gas de Fermi confinado por medio de una trampa armónica, la variable termodinámica análoga al volumen para el caso de una caja, está determinada por la frecuencia de la trampa, que a su vez define otras propiedades del sistema así como la densidad de estados.

La dependencia de la densidad de estados para una energía dada es diferente para cada tipo de potencial. En el caso en el que el potencial es una caja de volumen  $V$ , la dependencia va como la raíz cuadrada de la energía, Ec. (3.5), mientras que para la trampa armónica es cuadrática, Ec. (3.38), por lo que se espera que al cambiar la densidad de estados las variables termodinámicas cambien dependiendo del potencial de confinamiento.

El calor específico a cualquier temperatura, tiene diferentes límites conforme  $T \rightarrow \infty$ , dependiendo del potencial externo que confina a los átomos. En la Figura 3.6 se muestran las gráficas correspondientes a los gases estudiados en esta sección, que corresponden a las ecuaciones (3.18) y (3.53).

En el régimen de bajas temperaturas, el calor específico de ambos gases de Fermi se comportan de manera lineal, pero con diferente pendiente, este comportamiento se muestra en la Figura 3.7. Como el calor específico es la cantidad de calor necesaria para aumentar la temperatura de un cuerpo en un grado centígrado, la Figura 3.7 indica que se necesita una mayor cantidad de calor para aumentar la temperatura de un gas confinado por medio de una trampa armónica que en el caso de un gas de Fermi en una caja. Por lo tanto, es más fácil mantener frío a un gas que está atrapado armónicamente.

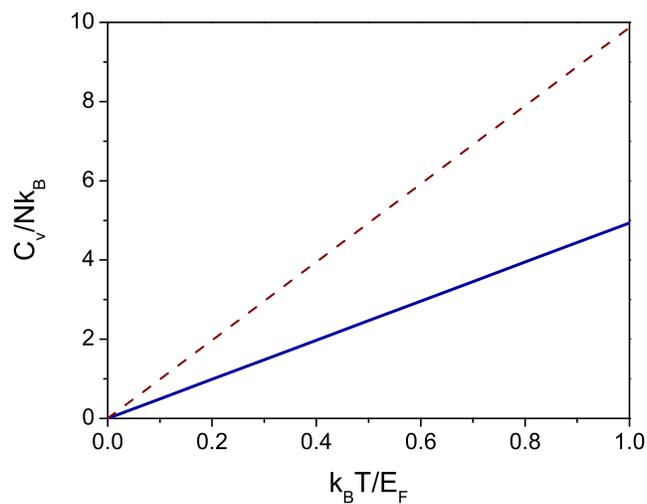


**Figura 3.6:** Calor específico a cualquier temperatura. La línea punteada indica el comportamiento del gas de Fermi en una caja, mientras que la sólida indica el comportamiento del gas de Fermi en una trampa armónica.

La Figura 3.8 muestra el potencial químico a bajas temperaturas.

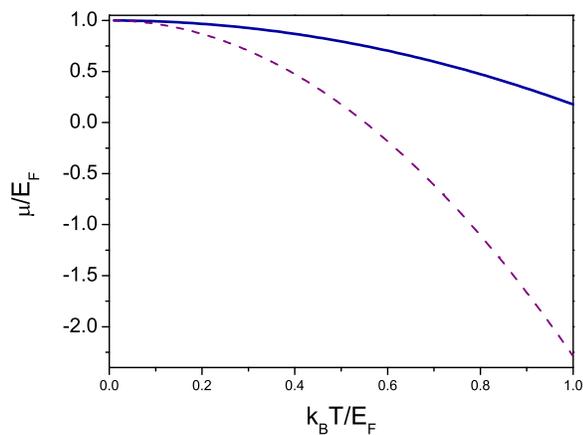
Por último, la Figura 3.9 indica el régimen de altas temperaturas para el potencial químico.

Las gráficas de esta sección resumen las propiedades termodinámicas de los gases ideales de Fermi para los potenciales de confinamiento armónico y de caja de volumen  $V$ . Aunque en este capítulo hemos presentado la termodinámica convencional del gas de Fermi ideal

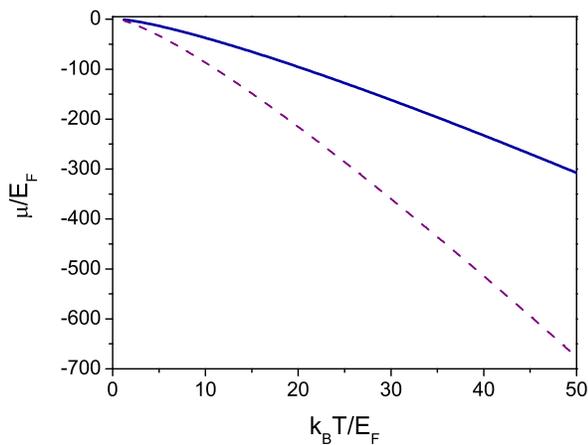


**Figura 3.7:** Calor específico a bajas temperaturas. La línea punteada indica el gas de Fermi en una trampa armónica. La línea sólida indica la del gas de Fermi en una caja.

para dos tipos de potenciales de confinamiento, actualmente hay trabajos que se dedican a identificar las variables termodinámicas de los gases ultrafríos para diferentes potenciales de confinamiento, por ejemplo, el trabajo de la Referencia [45].



**Figura 3.8:** Potencial químico en el régimen de bajas temperaturas para los dos potenciales de confinamiento analizados. La línea punteada corresponde al gas de Fermi confinado por medio de una trampa armónica y la línea sólida el gas de Fermi confinado por una caja.



**Figura 3.9:** Potencial químico en el régimen de altas temperaturas para los dos potenciales de confinamiento analizados. La línea punteada corresponde al gas de Fermi confinado por medio de una trampa armónica y la línea sólida el gas de Fermi confinado por una caja.



# Sistema de dos fermiones interactuantes y confinados por medio de una trampa armónica.

## 4.1 Introducción.

Experimentalmente, los gases atómicos ultrafríos están confinados por un potencial externo aproximadamente armónico, generado por una trampa ya sea óptica, magnética o magneto-óptica, en estos sistemas los átomos interactúan entre sí. Para mezclas de fermiones las resonancias de Feshbach son una vía para controlar la interacción entre ellos. Si los fermiones interactúan se formarán pares de Cooper en el límite BCS o moléculas en el límite BEC. En el caso en que la resonancia de Feshbach sea muy ancha será válida la descripción que involucra un solo canal de dispersión con un potencial efectivo. En el trabajo teórico de la presente tesis, queremos modelar cómo es la interacción entre los fermiones para comprender de alguna manera cuándo se forma una molécula o el par de Cooper, tomando en cuenta que están confinados. El modelo más sencillo de potencial de interacción es aquél en que el potencial es de contacto, sin embargo, este potencial no puede aplicarse cuando  $\alpha \rightarrow |\infty|$  pues en esta región este potencial no está definido y además tiene dificultades numéricas. Por otra parte, la hipótesis de universalidad predice que durante el cruce BCS-BEC la forma específica del potencial no será relevante siempre y cuando: (i) sea de un alcance mucho menor a la distancia interatómica y (ii) que tenga sentido físico aún cuando  $\alpha \rightarrow \pm\infty$ .

En la presente tesis el sistema a estudiar es un gas degenerado de fermiones, confinados por medio de una trampa armónica isotrópica, que interactúa por medio de un potencial de corto alcance; la interacción predominante es la dada a través de pares de fermiones. Para entender este sistema, es necesario entender la física del problema de dos cuerpos

que interactúan por medio de un potencial de corto alcance y que están confinados, dicha descripción se presenta en este capítulo. En la primera sección se hace una reseña de los potenciales que pueden modelar la interacción entre fermiones, éstos son tanto de corto alcance como de rango cero, como lo es el potencial de contacto. En la siguiente sección se plantea el hamiltoniano de un sistema de dos partículas que están confinadas e interactúan por medio de un potencial exponencial, tanto en el caso en el cual las partículas están confinadas como cuando no lo están. Se describe la forma de resolver esos sistemas, obteniendo las eigenfunciones y eigenenergías para diferentes valores de la longitud de dispersión, así como una breve discusión de la influencia del potencial de confinamiento. Finalmente se hace una descripción de la solución analítica de dos partículas confinadas cuyo potencial de interacción es el potencial de contacto, haciendo una comparación entre estos resultados y los obtenidos con el potencial exponencial de corto alcance.

La importancia de estudiar el sistema de dos partículas es que las eigenfunciones obtenidas permitirán construir una base para el sistema de muchos cuerpos [57], además de que incluso un sistema de dos cuerpos permite conocer las implicaciones de tener un sistema confinado, pues tanto las eigenfunciones como las energías cambian debido al potencial externo.

## 4.2 Potenciales efectivos como modelo de la interacción.

Los gases de Fermi degenerados son gases diluidos, donde hay colisiones de dos cuerpos. A primera aproximación, el potencial interatómico se puede modelar como un potencial central  $V(r)$ . A grandes distancias, es decir, distancias más grandes que el tamaño de los orbitales electrónicos de un átomo, la interacción se puede representar por medio del potencial de van der Waals [128]:

$$-C_6/r^6, \tag{4.1}$$

$C_6$  es un coeficiente que depende del átomo en cuestión. Para este potencial hay un parámetro conocido como longitud de van der Waals  $\ell_{vdw}$ , el cual es:

$$\ell_{vdw} = \left( \frac{mC_6}{\hbar^2} \right)^{1/4}, \tag{4.2}$$

para átomos alcalinos  $\ell_{vsw}$  es del orden de nanómetros.

A distancias pequeñas, las nubes de los electrones se repelen entre sí, por ejemplo en el caso de las átomos alcalinos el potencial de interacción tiene un núcleo duro repulsivo (repulsive hard core) que es muy profundo, por lo que, hacer una descripción exacta del potencial interatómico del gas es sumamente complicada [94]. Los gases que se estudian son ultrafríos y ultradiluidos, permitiendo que la longitud de de Broglie  $\lambda_B$  y la distancia entre partículas  $n^{1/3} \sim 5000 - 10000a_0^1$  sean más grandes que el alcance del potencial

---

<sup>1</sup> $a_0$  es el radio de Bohr

interatómico,  $r_0$ ,<sup>2</sup> lo que conlleva a que la descripción del sistema para gases ultrafríos en el canal de onda- $s$  sea en términos de un solo parámetro el cual es la longitud de dispersión, como se mencionó en el primer capítulo.

Si la longitud de de Broglie de las partículas que colisionan es más grande que el rango de interacción del potencial interatómico  $1/k \gg r_0$ , se puede hacer una descripción del sistema utilizando un potencial efectivo, que facilite los cálculos, siempre y cuando dicho potencial efectivo reproduzca la correcta longitud de dispersión, es decir, para los gases ultrafríos los detalles del potencial de interacción a rangos pequeños no son relevantes, sólo lo es el comportamiento a bajas energías de la amplitud de dispersión, por lo tanto cualquier potencial modelo de la interacción que sea de corto alcance y que tenga el mismo valor de la longitud de dispersión que el potencial real es, en principio, un buen modelo de potencial de interacción. Como modelos de potenciales efectivos se pueden utilizar potenciales de corto alcance como un potencial exponencial o bien el pseudopotencial, que se introdujo en la primera sección del primer capítulo, los cuales se describen a continuación.

### 4.2.1 Potencial de contacto.

El potencial de contacto que se presentó en el primer capítulo, es el potencial más simple que describe la interacción entre partículas ultrafrías. Fue introducido por Fermi [129] para estudiar colisiones de neutrones, y es frecuentemente utilizado en física nuclear. Bethe y Peierls lo usaron en el estudio del deuterón, un sistema consistente de un protón y un neutrón, donde obtuvieron diversas propiedades de la dispersión de este sistema en el canal de onda- $s$ , al reemplazar la interacción neutrón-protón por una adecuada condición a la frontera de la función de onda. Posteriormente, Breit [131] demostró que el potencial introducido por Fermi y el trabajo de Bethe y Peierls, son equivalentes si el potencial delta es regularizado

$$\delta(r)f(\vec{r}) \rightarrow \hat{\delta}_{reg}^{(\ell=0)}f(\vec{r}) = \frac{\delta(r)}{4\pi r^2} \left[ \frac{\partial}{\partial r'} r' \int d\Omega' f(\vec{r}') \right]_{r'=0}$$

donde  $\vec{r}$  es la separación entre partículas.

Hay varias formas de introducir el potencial delta regularizado [125, 132, 133]. Por ejemplo, podemos considerar el potencial de esfera dura cuando el radio de ésta tiende a cero, esta condición equivale a imponer como condición a la frontera que la función de onda se comporte como:

$$\Psi(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \left(1 - \frac{\alpha}{r}\right)\chi, \quad (4.3)$$

la función  $\chi$  se determina a partir de la Ec. (4.3), pues esta condición implica que en la región de distancias cortas se cumple:

<sup>2</sup>En el caso de un potencial de van der Waals  $r_0 \sim (\mu C_6/\hbar^2)^{1/4}$  por ejemplo para  ${}^6\text{Li}$   $r_0 \sim 50a_0$

$$r^2 \frac{\partial}{\partial r} \rightarrow \alpha \frac{\partial(r\Psi)}{\partial r}. \quad (4.4)$$

Integrando la ecuación anterior sobre el ángulo sólido se obtiene la expresión para  $\chi$ :

$$\chi = \frac{\partial(r\Psi)}{\partial r}. \quad (4.5)$$

Al sustituir la función de onda, Ec. (4.3) en la ecuación de Schrödinger, se obtiene el siguiente potencial

$$V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = g\delta(\vec{r}) \left( \frac{\partial}{\partial r}(r\Psi(\vec{r})) \right), \quad (4.6)$$

donde  $g = 4\pi\hbar^2\alpha/m$  es la constante de acoplamiento.

Algunas propiedades de la regularización del potencial delta son:

- ⊗ Si la función de onda es regular en  $\vec{r} = 0$ , la definición del pseudopotencial, Ec. (4.6), conduce a

$$V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = g\Psi(0)\delta(\vec{r}),$$

con lo que recupera el potencial de contacto

- ⊗ Si la función  $\Psi$  se puede escribir como  $\Psi = u(r)/r$ , con  $u(r)$  una función regular en el origen, la acción del potencial sobre esta función está bien definida:

$$V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = g \left( \frac{\partial u}{\partial r} \right)_{r=0} \delta(\vec{r})$$

La expresión explícita para el caso de dos partículas que interactúan por medio de este potencial es:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = g\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left( \frac{\partial}{\partial r_{12}}(r_{12}\Psi_{1,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)) \right) \quad (4.7)$$

$r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ . Las propiedades del pseudopotencial escrito en términos de las coordenadas de las partículas son:

- ⊗ Cuando la función de onda  $\Psi_{1,2}$  es regular en el límite  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ , el pseudopotencial se puede ver como un potencial de contacto:  $g\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ .
- ⊗ Cuando la función de onda tiene una divergencia, el pseudopotencial remueve esa divergencia.

### 4.2.2 Potenciales de corto alcance.

El pseudopotencial de contacto es un potencial que modela la interacción de átomos ultrafríos, pero no es el único potencial que se puede utilizar para modelar la interacción de los átomos; como ya se ha mencionado, en principio, se puede utilizar cualquier potencial de corto alcance sólo con la condición que ese potencial reproduzca el valor de la longitud de dispersión. En la presente tesis se hace un estudio del cruce BCS-BEC como función de la longitud de dispersión; para poder hacer los cálculos Monte-Carlo en la region de unitariedad donde la longitud de dispersión diverge, es conveniente utilizar un potencial de corto alcance en vez de utilizar el pseudopotencial.

Algunos de los potenciales que han sido usados comunmente en la literatura, sobre todo en física nuclear, son [94, 132, 134]:

✱ Potencial Gaussiano

$$V(r) = -V_0 e^{-r^2/r_0}$$

✱ Potencial de Yukawa

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/b}}{r/b}$$

✱ Pozo

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 & r < b \\ V(r) &= 0 & r > b \end{aligned}$$

En este caso se conoce la expresión de la longitud de dispersión:

$$\alpha = b - \frac{\tanh k_0 b}{k_0}, \quad (4.8)$$

la cual tiene las siguientes características: Cuando  $k_0 b < \pi/2$ , sólo hay un estado ligado en el potencial, la longitud de dispersión  $\alpha$  es negativa. Si se incrementa la profundidad del pozo  $V_0$ , la longitud de dispersión diverge cuando  $k_0 b = \pi/2$ . En general, las resonancias ( $\alpha \rightarrow |\infty|$ ) ocurren cuando  $k_0 b = (2n + 1)\pi/2$ , con  $n$  un número entero. Cuando la longitud de dispersión es un poco mayor que esta condición de resonancia la longitud de dispersión es positiva.

✱ Potencial de Van der Waals truncado.

$$\begin{aligned} V(r) &= +\infty & r < b \\ V(r) &= -\frac{C_6}{r^6} & r > b \end{aligned}$$

La expresión para la longitud de dispersión es:

$$\alpha \simeq \tilde{\ell}_{vdw}(1 - \tan \theta) \quad (4.9)$$

donde  $\tilde{\ell}_{vdw} \simeq 0.478\ell_{vdw}$  y el ángulo  $\theta$  depende de la posición del átomo.

$$\theta = \frac{\ell_{vdw}^2}{2b^2} - \frac{3\pi}{8}, \quad (4.10)$$

por ejemplo para un átomo de Cesio ( $\theta \simeq 140$ ). Para obtener este valor se requiere que existan varios estados ligados en el pozo de potencial.

✱ Potencial Pöschl-Teller modificado

$$V(r) = -V_0 \frac{2\hbar^2}{m} \frac{\eta^2}{\cosh^2(\eta r)}.$$

Este potencial ha sido utilizado para modelar los gases ultrafríos [51]. El rango efectivo es  $2/\eta$ . Tiene soluciones analíticas, las cuales permiten obtener una expresión para los corrimientos de fase en el caso de onda- $s$   $\delta_0$  [135]:

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} - \sum_{n=1}^{2n-1} \tan^{-1} \frac{2q}{n}, \quad (4.11)$$

donde  $q = k/2\eta$ . A partir de esta expresión se puede conocer la longitud de dispersión  $\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}$

✱ Potencial exponencial:

$$-V_0 e^{-2r/b}, \quad V_0 > 0.$$

El alcance de este potencial es  $r_0 = b/2$ , este es el potencial con el cual se desarrollarán los cálculos de la presente tesis. Tiene la característica que se conoce una expresión analítica para la longitud de dispersión en onda- $s$  [136], la cual se muestra en la siguiente sección.

### 4.3 Sistema de dos partículas interactuantes sin potencial de confinamiento.

Antes de describir el sistema en estudio de dos partículas interactuantes y atrapadas, en esta sección se describirá el sistema de dos partículas interactuantes sin potencial de confinamiento. Este sistema es importante, debido a que permite obtener una expresión analítica de la longitud de dispersión, parámetro que permite describir al sistema incluso cuando hay potencial de atrapamiento.

Consideremos el siguiente potencial de interacción, él cual tiene un alcance o rango  $r_V = b/2$ , dado por

$$V(r) = -V_0 e^{-2r/b}, \quad V_0 > 0 \quad (4.12)$$

donde  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  es la distancia relativa entre las partículas. La ecuación de Schrödinger del sistema se puede separar obteniendo una ecuación para la coordenada del centro de masa y otra para la coordenada relativa, siendo esta última:

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \right] \phi(r) = E \phi(r). \quad (4.13)$$

En el caso de onda- $s$ , la Ec. (4.13), tiene soluciones analíticas  $\phi(r) = v(r)/r$  tanto para el caso del continuo, de energías positivas:

$$v(y) = c_1 J_{ib\sqrt{Em}/\hbar}(y) + c_2 J_{-ib\sqrt{Em}/\hbar}(y), \quad (4.14)$$

como en la región de estados ligados:

$$v(y) = c_+ J_{b\sqrt{|E|m}/\hbar}(y). \quad (4.15)$$

En estas ecuaciones se utiliza que  $y = (b\sqrt{V_0 m}/\hbar)e^{-r/b}$  y  $J_\nu$  es la función de Bessel de primer tipo y orden  $\nu$ . Imponiendo las condiciones de frontera en el origen  $\varphi(0) = 0$ :

$$c_1 J_{ib\sqrt{Em}/\hbar}(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) + c_2 J_{-ib\sqrt{Em}/\hbar}(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) = 0, \quad (4.16)$$

y en el comportamiento asintótico

$$\lim_{y \rightarrow 0} \{c_1 J_{ib\sqrt{Em}/\hbar}(y) + c_2 J_{-ib\sqrt{Em}/\hbar}(y)\} = \text{sen}(kr + \delta_0), \quad (4.17)$$

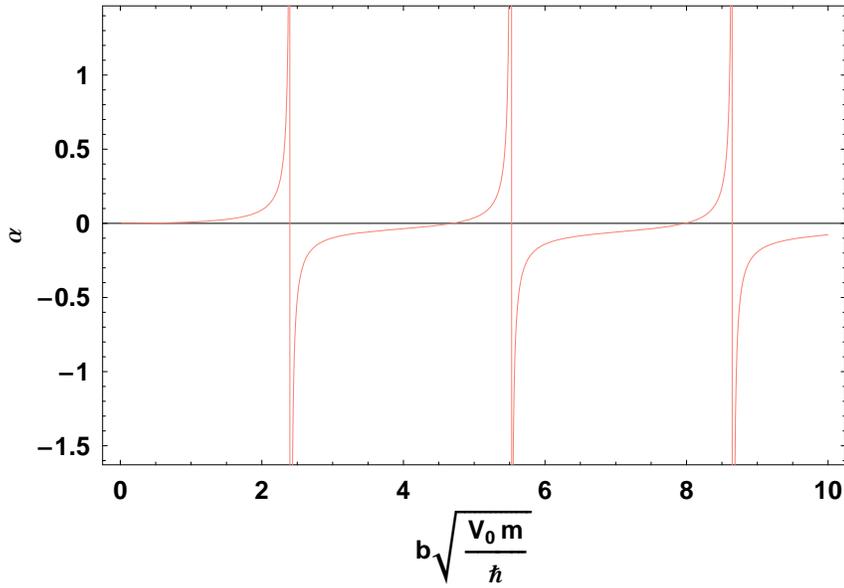
y permitiendo que los eigenvalores se aproximen a cero,  $E \rightarrow 0^+$ , se obtiene la siguiente expresión para la longitud de dispersión de onda- $s$ :

$$\alpha = -b \left[ \frac{\pi N_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar)}{2 J_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar)} - \log(b\sqrt{V_0 m}/2\hbar) - C \right]; \quad (4.18)$$

donde  $N_0$  es la función de Bessel de segundo tipo y de orden cero; y  $C$  es la constante de Euler. Observamos que la longitud de dispersión diverge cuando  $J_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) = 0$ , es decir cuando  $b\sqrt{V_0 m}/\hbar$  toma el valor de un cero de Bessel  $z_t$ . En la Figura 4.1 se muestra la dependencia de la longitud de dispersión como función de  $V_0$ . Si  $z_t, t = 0, 1, 2, \dots$  son los ceros de la función de Bessel, en orden ascendente, el potencial  $V(r)$  admite  $t$  estados ligados cuando  $z_t < b\sqrt{V_0 m}/\hbar < z_{t+1}$ .

## 4.4 Sistema de dos partículas interactuantes y atrapadas.

Las interacciones de átomos en trampas es un tema de actualidad e interés que puede tener diferentes aplicaciones. La principal característica que hace que la interacción en



**Figura 4.1:** Longitud de dispersión  $\alpha$  como función de  $b\sqrt{\frac{V_0 m}{\hbar}}$ .

estos sistemas difiera de aquellas relacionadas con las colisiones ultrafrías en el espacio libre es la presencia de la trampa. Cuando no hay un potencial de confinamiento, la interacción se muestra por medio de la sección diferencial transversal y los corrimientos de fase, pero estas cantidades pierden significado en presencia de la trampa; sin embargo, otros parámetros mantienen su vigencia como, en este caso, la longitud de dispersión. Además en presencia de la trampa, el sistema se caracteriza con un espectro de energías. En esta sección se estudia el problema de dos partículas interactuantes y confinadas [137].

El sistema a estudiar son dos fermiones en dos diferentes estados de espín, de tal forma que sólo se considera el canal de onda- $s$ , despreciando las demás contribuciones de las ondas parciales como lo es la dispersión de onda- $p$ . La interacción entre las dos partículas está dada por un potencial exponencial de corto alcance, y además se encuentran confinadas por medio de un potencial armónico. El hamiltoniano de este sistema es:

$$\hat{H}(\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow) = \sum_{i=\uparrow\downarrow} \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} + V_{ext}(\vec{r}_i) + v_{int}(|\vec{r}_\uparrow - \vec{r}_\downarrow|) \right], \quad (4.19)$$

Donde  $v_{int}(|\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow|)$  es el potencial de interacción que depende sólo de la distancia entre las partículas, Ec. (4.12) y  $V_{ext}(\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow)$  es el potencial externo, en este caso la trampa armónica,  $V_{ext}(\vec{r}_\uparrow, \vec{r}_\downarrow) = \frac{\omega^2}{2} [m_\uparrow \vec{r}_\uparrow^2 + m_\downarrow \vec{r}_\downarrow^2]$ ,  $m_\uparrow$  y  $m_\downarrow$  son las masas de la partícula 1 en el estado  $\uparrow$  y de la partícula 2 en el estado  $\downarrow$  respectivamente. En este caso utilizamos  $m_\uparrow = m_\downarrow = m$ .

Debido a que el potencial de confinamiento es un potencial armónico con simetría

esférica, la ecuación de Shrödinger se puede separar en dos ecuaciones, una correspondiente a la ecuación del centro de masa:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\mathbf{R}^2\right]\Phi(\mathbf{R}) = E_{CM}\Phi(\mathbf{R}), \quad M = 2m, \quad (4.20)$$

que es la ecuación del oscilador armónico y la correspondiente a la coordenada relativa:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\mathbf{r}^2 - V_0e^{-2r/b}\right]\varphi(\mathbf{r}) = \epsilon\varphi(\mathbf{r}), \quad \mu = \frac{m}{2}. \quad (4.21)$$

Esta ecuación se puede resolver de forma numérica para valores dados de  $b$  y  $V_0$ . Para resolver la Ec. (4.21), se escribe el laplaciano del operador de momento en coordenadas esféricas y se utiliza el método de separación de variables, proponiendo como solución:  $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ , donde  $R(r) = U(r)/r$  obteniendo la siguiente ecuación radial para  $U(r)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \ell(\ell+1)U(r) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 U(r) - V_0 e^{-\frac{2r}{b}} U(r) = \epsilon U(r). \quad (4.22)$$

La ecuación anterior se escribe de forma adimensional utilizando la longitud natural del oscilador armónico

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (4.23)$$

y el parámetro adimensional  $\rho = r/\sqrt{\hbar/2\mu\omega}$  obteniendo:

$$-\frac{d^2U}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \ell(\ell+1)U + \frac{1}{4}\rho^2 U - \frac{V_0}{\hbar\omega} e^{-\frac{2\beta\rho}{b}} U = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} U. \quad (4.24)$$

El caso a estudiar es el de onda-s que corresponde a  $\ell = 0$ , por lo que la Ec. (4.24) es:

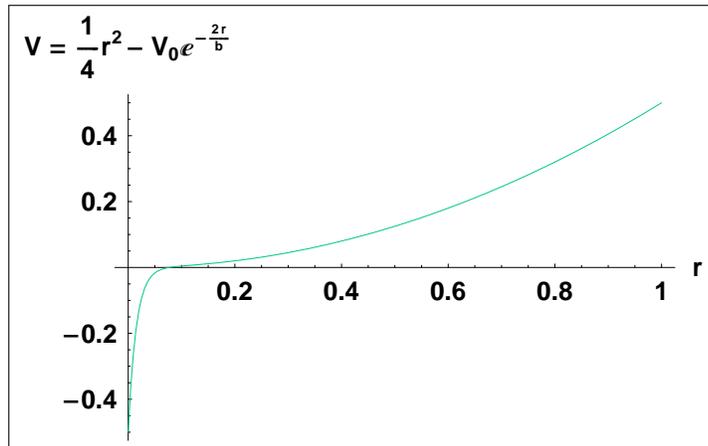
$$-\frac{d^2U}{d\rho^2} + \frac{1}{4}\rho^2 U - \frac{V_0}{\hbar\omega} e^{-\frac{2\beta\rho}{b}} U = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} U; \quad (4.25)$$

siendo el potencial efectivo de la ecuación anterior:

$$V_{eff} = \frac{1}{4}\rho^2 - \frac{V_0}{\hbar\omega} e^{-\frac{2\beta\rho}{b}}; \quad (4.26)$$

en la Figura 4.2 se ilustra este potencial efectivo. Para este problema, la longitud de dispersión que caracteriza al sistema es la correspondiente al sistema interactuante y sin confinamiento, Ec. (4.18), la razón es que aunque propiamente en el problema con confinamiento no se define una longitud de dispersión como tal, se puede hacer un mapeo entre las soluciones de los dos sistemas, el de confinamiento y sin confinamiento y ver que les corresponde la misma longitud de dispersión.

La Ec. (4.25) se resuelve de forma numérica para conocer:



**Figura 4.2:** Potencial  $V = \frac{1}{4}\rho^2 - \frac{V_0}{\hbar\omega} e^{-2\frac{\beta}{b}\rho}$ .

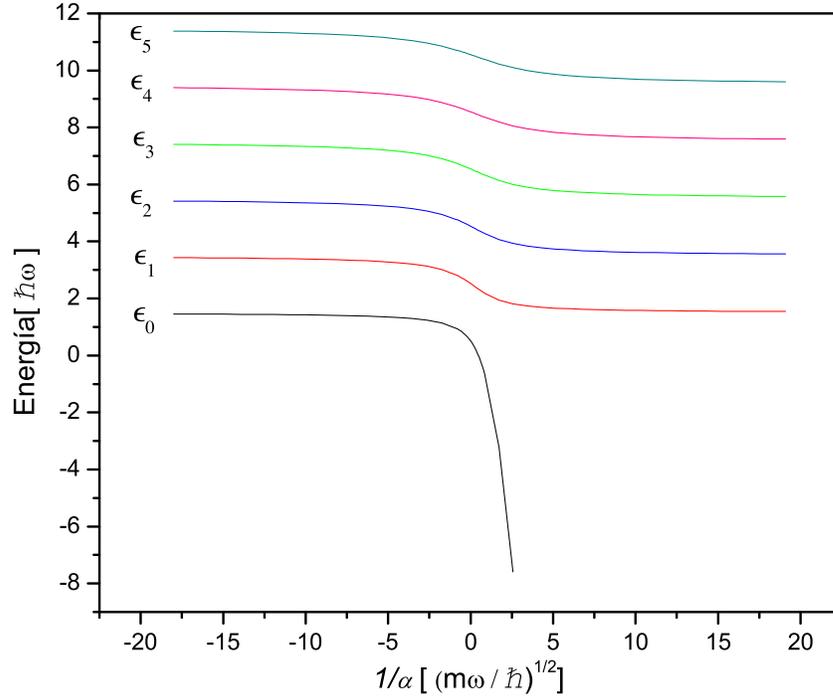
- Los eigenvalores de la ecuación.
- La eigenfunción correspondiente a cada eigenvalor.

En esta sección el valor que se utilizará para el parámetro  $b$ , ( $r_v = b/2$ ) es  $b = 0.03 \sqrt{\hbar/2\mu\omega}$ . Para escoger este valor se tomó en cuenta que el rango de la interacción o alcance del potencial debe ser pequeño comparado con la distancia natural de la trampa. A continuación se describen los correspondientes eigenvalores y eigenenergías.

### 4.4.1 Energías.

Para obtener los eigenvalores de la energía tanto en el caso de dos partículas interactuantes confinadas Ec. (4.25), como sin trampa Ec. (4.13), se utilizan métodos numéricos para diferentes valores del parámetro  $b$  y de la amplitud de potencial  $V_0$ . El programa utilizado se escribió en lenguaje FORTRAN. Este programa utiliza las librerías IMSL, las cuáles son un conjunto de programas y subrutinas escritas en lenguaje fortran, que cuentan con el aval de décadas de uso y optimización que garantiza estabilidad numérica en las soluciones, y entre estas subrutinas se encuentran unas que permiten resolver ecuaciones diferenciales. Utilizando estas librerías se diseña un programa que encuentra el valor adecuado del eigenvalor dada una ecuación diferencial ordinaria, en este caso la Ec. (4.25).

Los eigenvalores de onda- $s$  de la ecuación Ec. (4.25) se muestran en la Figura 4.3 y en las Tablas 4.1 y 4.2. En la Tablas se muestra la energía del estado base  $E_0$ , y las energías de los  $i$ -estados excitados,  $E_i$  ( $i=1,2,3$ ), para un valor dado del alcance del potencial  $b/2$  y diferentes valores de la amplitud del potencial  $V_0$ . Los valores de  $V_0$  que se consideraron en la Figura 4.3 y en la Tabla 4,1, toman los valores desde cero hasta el máximo valor de la amplitud  $V_{max}$ , tal que solo se admite la presencia de un estado ligado. Para la Tabla 4.2, se muestran valores del potencial donde se admiten hasta dos estados ligados. El valor del



**Figura 4.3:** Energías de los primeros eigenvalores de la energía para el caso de onda-s para el sistema de dos partículas interactuantes y atrapadas como función del inverso de la longitud de dispersión hasta la primera resonancia. Se utilizó como alcance del potencial  $b/2 = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$  y una amplitud del potencial  $V_0$  que varía desde  $V_0 \sim 0$  hasta el valor máximo de  $V_0$  que permite tener a lo más un estado ligado. La energía se mide en unidades de  $\hbar\omega$  y la longitud de dispersión en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

inverso de la longitud de dispersión cubre el intervalo de  $(-\infty, \infty)$ . Cuando en las Tablas se escriben dos renglones para el mismo valor de la longitud de dispersión, el primero muestra el caso donde no hay potencial de confinamiento, mientras que el segundo incluye el término de la trampa. Cuando sólo se muestra un renglón, dichos valores se refieren al problema con interacción y potencial de confinamiento.

Para valores de la amplitud del potencial que cumplen la siguiente condición:

$$V_0 < z_0 \hbar^2 / (mb^2) = \tilde{v}_0,$$

que significa que el valor de la amplitud de dispersión es menor que la condición de resonancia  $\tilde{v}_0$ , el sistema tiene valores de la longitud de dispersión negativos y no existen estados ligados. En este caso, las energías del gas atrapado son menores que  $3/2\hbar\omega$ , que corresponde a la energía del sistema confinado y no interactuante.

Cuando el valor de la amplitud de dispersión es igual al valor donde se presenta la resonancia,  $V_0 \simeq \tilde{v}_0$ , la longitud de dispersión diverge, y la energía del estado base del sistema interactuante y atrapado tiende a  $1/2\hbar\omega$ , mientras que la energía de los estados excitados va como  $\sim (2n + 1/2)\hbar\omega$ . A medida que el valor de la amplitud del potencial aumenta,  $V_0 > \tilde{v}_0$ , se observa de la Tabla 4.1 y 4.2, que la diferencia entre la energía del estado base para el gas atrapado y el homogéneo<sup>3</sup> tiende a cero, es decir, las energías son muy semejantes. Cuando  $V_0 \gg \tilde{v}_0$ , la longitud de dispersión tiende a cero,  $\alpha \rightarrow 0^+$ , y la energía del primer estado excitado tiende a  $3/2\hbar\omega$ . Cabe destacar que en este límite donde la longitud de dispersión diverge, la interacción de contacto sin potencial de atrapamiento admite la presencia de un estado ligado con energía de ligadura que diverge, pero como en este caso  $V_0$  tiene un valor finito, se obtiene que energía tiene un valor finito y cercano a  $1/2\hbar\omega$ .

Si el valor de la amplitud del potencial aumenta hasta llegar al valor donde se alcanza la condición de la segunda resonancia de energía cero,  $\tilde{v}_1$ , es decir:

$$V_0 \rightarrow z_1 \hbar^2 / (mb^2) = \tilde{v}_1,$$

la eigenenergía correspondiente al primer estado excitado se aproxima al valor  $1/2\hbar\omega$ , mientras que para el caso de los demás estados excitados, éstos se encuentran espaciados entre sí por un factor de  $\sim 2\hbar\omega$ . Al incrementar el valor de  $V_0$ , se observa que la diferencia entre el *primer* estado excitado de la energía para los átomos tanto atrapados como el sistema homogéneo, tiende a cero. Estos resultados numéricos muestran que la longitud de dispersión  $\alpha$  es el parámetro importante para determinar las principales características de la interacción. Por ejemplo,  $\alpha$  determina los estados cuyos eigenvalores tienen  $E > 1/2\hbar\omega$  sin considerar el número de estados que tienen  $E < 1/2\hbar\omega$ ; parece ser que los estados con  $E > 1/2\hbar\omega$  heredan el papel de los estados de “dispersión” en el espacio libre, y que el estado con energía  $E = 1/2\hbar\omega$  reemplaza el valor de la energía para el estado de resonancia cero cuando  $\alpha \rightarrow |\infty|$ .

Hay que notar que para el caso del sistema interactuante y confinado el concepto de energía de ligadura o de energía de enlace debe modificarse. Para partículas libres, esta energía se define como la energía necesaria para que la partícula alcance el estado del continuo, pero debido a lo discutido en el párrafo anterior, para átomos atrapados debe definirse como la diferencia entre la energía del estado bajo en consideración y el que tenga una menor energía y que cumpla que  $E > \hbar\omega/2$ . Una posible forma de medir tales energías puede ser la disociación de una molécula considerando el potencial de atrapamiento. En la Figura 4.4, se muestra la diferencia de energías medidas con y sin trampa armónica como función del inverso de la longitud de dispersión.

---

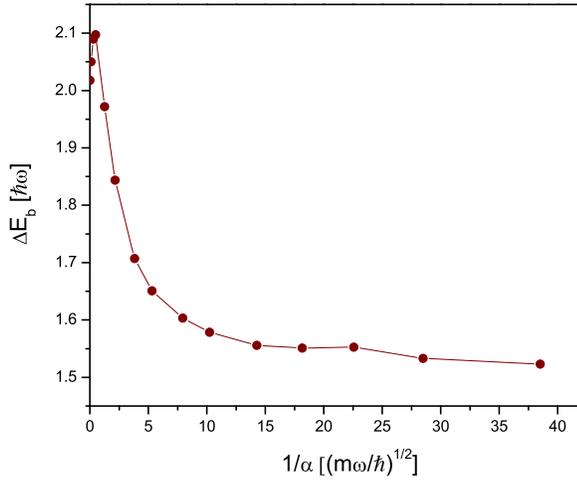
<sup>3</sup>Un sistema homogéneo es aquel donde hay potencial de interacción entre partículas pero no hay potencial de confinamiento, es decir, un sistema descrito por la Ec. (4.13).

$\alpha$ $\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$	$V_0$ $[\hbar\omega]$	$E_0$ $[\hbar\omega]$	$E_1$ $[\hbar\omega]$	$E_2$ $[\hbar\omega]$
-0.0525	3614.504	1.45885	3.43836	5.42338
-0.1106	4720.985	1.41502	3.37331	5.34333
-0.1879	5310.566	1.36008	3.29344	5.24771
-0.5733	6017.906	1.14462	3.01448	4.94650
$\infty$	6425.786	0.510656	2.52659	4.53714
2.1035	6545.231	-0.23188		
2.1035	6545.231	0.00000	2.33058	4.38997
0.5810	6876.584	-3.2487		
0.5810	6876.584	-3.2079	1.94716	4.07045
0.1952	7933.069	-34.580		
0.1952	7933.069	-34.576	1.66094	3.73393
0.1170	9253.132	-115.04		
0.1170	9253.132	-115.04	1.59568	3.64153
0.0524	14458.02	-774.04		
0.0524	14458.02	-774.04	1.54230	3.55782

**Tabla 4.1:** Algunos eigenvalores de la energía para dos partículas que interactúan a través del potencial  $V_0 e^{-2r/b}$ , en el caso de onda-*s*, en la región de la primera resonancia. Para obtener estos eigenvalores se utilizó un alcance  $b/2 = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Cuando se muestran dos filas para un valor dado de  $\alpha$ , la fila superior corresponde a la interacción sin potencial de confinamiento mientras que la fila inferior corresponde a que las partículas están confinadas por una trampa armónica. Cuando sólo se muestra una fila, los valores corresponden al caso en el que las partículas están confinadas e interactúan entre sí.

$\alpha$ $\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$	$V_0$ $[\hbar\omega]$	$E_0$ $[\hbar\omega]$	$E_1$ $[\hbar\omega]$	$E_2$ $[\hbar\omega]$	$E_3$ $[\hbar\omega]$
-0.0584	28848.5	-4304.95			
-0.0584	28848.5	-4304.97	1.45460	3.43261	5.41691
-0.1173	30515.2	-4820.49			
-0.1173	30515.2	-4820.43	1.41078	3.36830	5.33877
-0.1804	31403.2	-5101.96			
-0.1804	31403.2	-5101.98	1.36631	3.30455	5.26333
-0.5732	32937.2	-5599.0			
-0.5732	32937.2	-5599.0	1.14909	3.02777	4.96757
$\infty$	33857.0	-5903.4			
$\infty$	33857.0	-5903.4	0.520239	2.54982	4.56705
2.0014	34152.3	-6002.0	-0.262403		
2.0014	34152.3	-6002.0	-0.031234	2.34447	4.41396
0.5812	34943.3	-6268.6	-3.52506		
0.5812	34943.3	-6268.6	-3.48380	1.95525	4.08711
0.1954	37779.3	-7250.0	-44.8408		
0.1954	37779.3	-7250.1	-44.8365	1.66185	3.73652
0.1176	41798.7	-8704.85	-177.821		
0.1176	41798.7	-8704.9	-177.819	1.59631	3.64283
0.0524	56857.6	-14699.7	-1334.76		
0.0524	56857.6	-14699.6	-1334.73	1.54229	3.56315

**Tabla 4.2:** Algunos eigenvalores de la energía para dos partículas que interactúan a través del potencial  $V_0 e^{-2r/b}$ , en la región de la segunda resonancia. Para obtener estos eigenvalores se utilizó un alcance  $b/2 = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Cuando se muestran dos filas para un valor dado de  $\alpha$ , la fila superior corresponde a la interacción sin potencial de confinamiento mientras que la fila inferior corresponde a que las partículas están confinadas por una trampa armónica. Cuando sólo se muestra una fila, los valores corresponden al caso en el que las partículas están confinadas e interactúan entre sí.



**Figura 4.4:** Diferencia entre las energías de ligadura calculados con los átomos atrapados interactuantes y sin potencial de confinamiento. La amplitud del potencial es tal que sólo admite un estado ligado para el sistema homogéneo. Se utilizó el valor de  $b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$  para los cálculos numéricos.

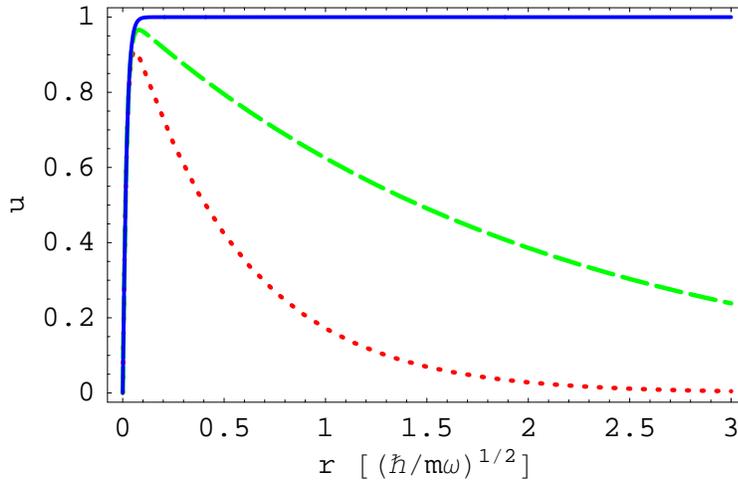
#### 4.4.2 Eigenfunciones.

El comportamiento general de las eigenfunciones de onda- $s$   $u_\alpha$  ( $\varphi_\alpha(r) = u_\alpha(r)/r$ ) se muestra en las figura 4.5 para partículas sin potencial de atrapamiento y en la Fig. 4.6 para partículas atrapadas. En el caso del sistema homogéneo, la función de onda que representa al estado de resonancia  $u_\infty(r)$ , la línea sólida, tiende a una constante diferente de cero conforme  $r \rightarrow \infty$ , mientras que  $u_{2,1}(r)$ , línea en segmentos, y  $u_{0,58}(r)$ , línea punteada, representan estados ligados en orden ascendente. Para partículas atrapadas, antes de que se llegue a la condición de resonancia la función de onda tiene en general, una estructura en la que se reconocen tres regiones, como se observa en la línea punteada de la Figura 4.6. Cerca del origen la pendiente de  $u_{-0,6}(r)$  es grande y positiva, cuando  $r \sim b/2$  sigue siendo positiva pero menor que uno hasta que alcanza un valor extremo en  $1 > r \gg b/2$  volviéndose negativa. En la región de resonancia la región intermedia se hace más pequeña de tal forma que el extremo se alcanza en  $r \sim b/2$ , sin embargo la función de onda decae con un factor exponencial  $\exp(-m\omega r^2/\hbar)$ .

A partir de los resultados numéricos se proponen soluciones analíticas. En la región de longitudes de dispersión positivas. El *ansatz* para la función de onda del estado base es:

$$\varphi(r) = v((b\sqrt{V_0 m/\hbar})e^{-r/b}) \exp(-m\omega r^2/\hbar)g(r)/r, \quad (4.27)$$

Donde  $v$  esta definida por la Ec. (4.15) que corresponde a los estados ligados del sistema



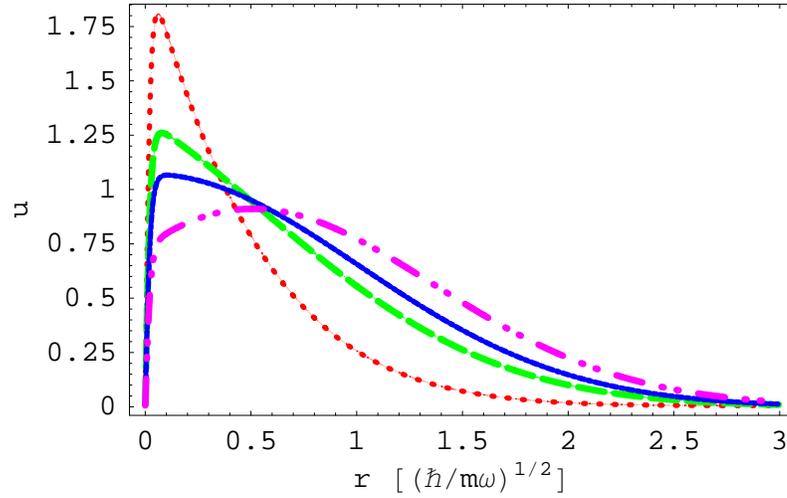
**Figura 4.5:** Funciones radiales  $u_\alpha(r)$ ,  $\phi_a(r) = u_a(r)/r$ , para partículas interactuantes sin potencial de confinamiento. La línea sólida corresponde a la función resonante de energía cero  $u_\infty(r)$ , la cual tiende a una constante diferente de cero conforme  $r \rightarrow \infty$ . Las funciones de onda  $u_{2.1}(r)$ , línea en segmentos, y  $u_{0.58}(r)$ , línea punteada corresponden a estados ligados en orden ascendente. Las funciones de ondas están normalizadas y la distancia es medida en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

homogéneo. La función  $g(r)$  corresponde numéricamente a una función constante 1, pues se obtiene que el rango de valores para  $g(r)$  está en el intervalo de (0.99,1.01). La estructura de la ecuación Ec. (4.27) para las eigenfunciones en  $\alpha \rightarrow |\infty|$  nos permite entender el origen del eigenvalor  $\sim 1/2\hbar\omega$ . En este caso,  $v(y(r))$  considera la condición en el origen  $v(0) = 0$  de tal forma que la ecuación efectiva para  $\psi(r) =: \varphi(r) \cdot r/v$  es casi idéntica a aquella correspondiente al oscilador armónico sin tomar en cuenta que debe ser cero en  $r = 0$ , permitiendo la posibilidad que la energía tome el valor  $E \sim 1/2\hbar\omega$ .

Para valores negativos de la longitud de dispersión, la solución numérica se aproxima a la siguiente expresión analítica para la función de onda:

$$\varphi_{apx}(r) = J_0(z_0 e^{-r/b}) e^{-m\omega r^2/4\hbar} (1 + c e^{-2r/b}) P(r/b)/r, \quad (4.28)$$

donde  $c$  es independiente de  $r$  y  $P(r/b)$  es un polinomio que depende del estado en cuestión. En el Apéndice B se muestran algunos de los valores de polinomios  $P(r/b)$ . Con el adecuado valor de  $c$  y del polinomio  $P(r/b)$ , que dependen del valor de  $V_0$  y de  $b$ , el ajuste con la función numérica es bastante adecuado, difiriendo sólo en un porcentaje del 0.01%. Para  $|V_0| \ll (z_0/b)^2 \hbar\omega$ , el polinomio  $P(r/b)$  es casi lineal, mientras que para  $|V_0| \leq (z_0/b)^2 \hbar\omega$ , resulta que  $c \approx 0$ . Para poder comparar qué tan adecuada es la función analítica propuesta respecto a la correspondiente solución numérica, se calculó la razón  $\varphi_{apx}(r)/\varphi_{num}(r)$  entre la expresión analítica aproximada, Ec. (4.28), y la solución numérica. El valor que se obtuvo para esta razón era de aproximadamente  $1 \pm 0.0001$  en el intervalo  $0 \leq r \leq 3\sqrt{\hbar/m\omega}$ .



**Figura 4.6:** Funciones radiales  $u_\alpha(r)$ ,  $\varphi_\alpha(r) = u_\alpha(r)/r$ , para el sistema de dos partículas atrapadas e interactuantes, Ec. (4.25). La curva punto-línea indica la función de onda correspondiente al estado base de onda- $s$  para una de longitudes de dispersión negativas, en este caso  $u_{-0.6}(r)$ . La curva sólida indica la función de onda en resonancia  $u_\infty(r)$ . Tanto la curva en segmentos como la punteada corresponden a funciones de onda con longitudes de dispersión positivas, la primera indica la función de onda  $u_{2.1}(r)$  mientras que la segunda muestra la función  $u_{0.58}(r)$ . En esta figura las funciones de ondas están normalizadas. La distancia se mide en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

Los resultados aquí presentados son un ejemplo de los que se calcularon para diferentes valores del parámetro  $b$ , el cual se estudió para valores  $0.005\sqrt{\hbar/m\omega} < b < 0.05\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

## 4.5 Dos partículas atrapadas que interactúan mediante el potencial regularizado.

En esta sección se describe el sistema de dos átomos confinados por medio de una trampa isotrópica y cuyo potencial de interacción es un potencial de contacto, en este caso el potencial delta regularizado, que modelará la interacción entre pares de partículas. El potencial es:

$$\begin{aligned} V_{contact}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) &= \frac{4\pi\hbar^2\alpha}{m}\delta_{reg}^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \\ &= \frac{\sqrt{2}\pi\hbar^2\alpha}{m}\delta^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)\frac{\partial}{\partial r}r \end{aligned}$$

La descripción de la solución analítica presentada en este capítulo se basa en la realizada por Busch et al, referencia [138], ellos consideran dos átomos que interactúan por medio

de un potencial de contacto y que están confinados por medio de un potencial armónico isotrópico. El hamiltoniano de este sistema es:

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}r_1^2 + \frac{1}{2}r_2^2 + 4\pi\alpha\delta_{reg}^{(3)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (4.29)$$

donde  $\vec{r}_1$  y  $\vec{r}_2$  son los vectores de posición de los dos átomos. Se usan nuevamente las unidades del oscilador armónico, donde las energías están en unidades de  $\hbar\omega$  y las distancias en  $\sqrt{\hbar/m\omega}$  del estado base de la trampa. La amplitud de la interacción está caracterizada por la longitud de dispersión  $\alpha$  y la interacción es la delta regularizada, Ec. (4.29).

Como en la sección anterior, el hamiltoniano del sistema se puede separar en una parte del centro de masa y una parte relativa,  $H = H_{CM} + H_{rel}$ , donde:

$$H_{CM} = -\frac{1}{2}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}\vec{R}^2 \quad (4.30)$$

$$H_{rel} = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 + \frac{1}{2}r^2 + \sqrt{2}\pi\alpha\delta^{(3)}(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r} \quad (4.31)$$

La coordenada del centro de masa es  $\vec{R} = \sqrt{1/2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$  y la coordenada relativa  $\vec{r} = \sqrt{1/2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ . Las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger para la coordenada del centro de masa son las eigenfunciones del oscilador armónico en coordenadas esféricas con energías  $E_{CM} = (2n + \ell + 3/2)\hbar\omega$ , con  $n$  y  $\ell$  los numeros cuánticos. La ecuación de Schrödinger para la coordenada relativa es:

$$\left( H_{osc} + \sqrt{2}\pi\alpha\delta^{(3)}(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r} \right) \psi(\vec{r}) = \mathcal{E}\psi(\vec{r}) \quad (4.32)$$

$H_{osc}$  se refiere al hamiltoniano del oscilador armónico isotrópico tridimensional. Nuevamente el hamiltoniano de dos partículas interactuantes y atrapadas se reduce al hamiltoniano efectivo de una partícula, esto se debió a que el potencial de confinamiento es separable, como lo es el potencial armónico.

Para resolver la ecuación (4.32) de forma analítica, se expande la función de onda  $\psi$  en términos de las eigenfunciones de onda del oscilador armónico  $\varphi_n(\vec{r})$ , ( $H_{osc}\varphi_n = E_n^{osc}\varphi_n$ ),

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \varphi_n(\vec{r}), \quad (4.33)$$

En la expansión, Ec. (4.33), solo se consideran los términos de  $\ell = 0$  correspondientes a onda-s. Al sustituir la Ec. (4.33) en Ec. (4.32) y proyectar en los estados  $\psi_n^*(\vec{r})$  se obtiene la siguiente expresión:

$$C_n(E_n^{osc} - \mathcal{E}) + \sqrt{2}\pi\alpha\varphi_n^*(0) \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \sum_{m=0}^{\infty} C_m \varphi_m(\vec{r}) \right) \right]_{r \rightarrow 0} = 0. \quad (4.34)$$

Por lo que los coeficientes  $C_n$  son:

$$C_n = A \frac{\varphi_n^*(0)}{E_n^{osc} - \mathcal{E}}. \quad (4.35)$$

$A$  es una constante de normalización de la función  $\psi(\vec{r})$ . Al sustituir la Ec. (4.35) en Ec. (4.34) se obtiene la siguiente expresión que se puede ver como una condición a la frontera:

$$\sqrt{2}\pi \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n^*(0)\varphi_n(\vec{r})}{E_n^{osc} - \mathcal{E}} \right) \right]_{r \rightarrow 0} = -\frac{1}{\alpha}. \quad (4.36)$$

Para poder calcular la energía del sistema se utiliza la siguiente representación de las funciones de onda del oscilador armónico para onda- $s$ :

$$\varphi_n(\vec{r}) = \pi^{-3/4} [L_n^{1/2}(0)]^{-1/2} e^{-r^2/2} L_n^{1/2}(r^2). \quad (4.37)$$

Al sustituir la ecuación anterior en la Ec. (4.36) se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r e^{-r^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^{1/2}(r^2)}{n - \nu} \right) \right]_{r \rightarrow 0} = \frac{1}{\alpha}. \quad (4.38)$$

Utilizando la siguiente representación integral

$$\frac{1}{n - \nu} = \int_0^{\infty} \frac{dy}{(1 + y^2)} \left( \frac{y}{1 + y} \right)^{n - \nu - 1} L_n^{1/2} L_n^{1/2}(r^2), \quad (4.39)$$

y la función generadora de los polinomios de Laguerre

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n^{1/2}(x) z^n = (1 - z)^{-3/2} \exp\left(\frac{xz}{z - 1}\right); \quad z = \frac{y}{1 + y}, \quad (4.40)$$

se obtiene:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^{1/2}(r^2)}{n - \nu} = \int_0^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{1 + y}} e^{-yr^2} \left( \frac{y}{1 + y} \right)^{-\nu - 1} = \Gamma(-\nu) U\left(-\nu, \frac{3}{2}, r^2\right). \quad (4.41)$$

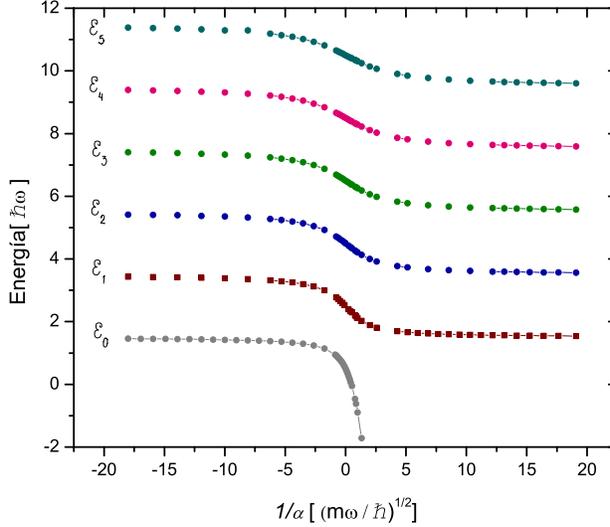
Por medio de la siguiente relación de la función hipergeométrica confluyente  $U$

$$\Gamma(-\nu) U\left(-\nu, \frac{3}{2}, r^2\right) = -\sqrt{\pi} \left( \frac{2\Gamma(-\nu)}{\Gamma(-\nu - 1/2)} - \frac{1}{r} + O(r) \right) \quad (4.42)$$

la ecuación (4.38) da lugar a una ecuación trascendental que relaciona la energía y la longitud de dispersión:

$$\sqrt{2} \frac{\Gamma(-\mathcal{E}/(2\hbar\omega) + 3/4)}{\Gamma(-\mathcal{E}/(2\hbar\omega) + 1/4)} = \frac{\sqrt{\hbar/m\omega}}{\alpha}, \quad (4.43)$$

La Figura 4.7 muestra el espectro de energías utilizando la ecuación anterior como función de  $1/k_F\alpha$ .



**Figura 4.7:** Espectro de energías para el potencial regularizado como función de  $1/k_F\alpha$ .

Para obtener las funciones de onda se utiliza la expansión de la función de onda  $\psi(\vec{r})$ , Ec. (4.33), la expresión de los coeficiente  $C_n$ , Ec. (4.35), la representación de las eigenfunciones del oscilador armónico para onda-s, Ec. (4.37), y la Ec. (4.41) obteniendo:

$$\psi(r) = \frac{A}{2\sqrt{\pi^3}} e^{-r^2/2} \Gamma(\nu) U\left(-\nu, \frac{3}{2}, \frac{\hbar r^2}{m\omega}\right), \quad \nu = \frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{3}{4}. \quad (4.44)$$

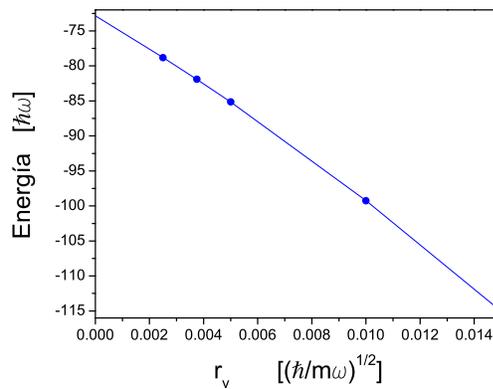
$A$  es una constante de normalización. Para obtener una expresión de la constante  $A$  se utiliza el método descrito en [139] y en [140], donde describen como normalizar funciones conocidas como funciones de Heun, donde se incluyen las funciones hypergeométricas confluentes. Al seguir este método se obtiene:

$$|A|^2 = \sqrt{2\pi}\alpha^2 \frac{\partial E}{\partial \alpha}. \quad (4.45)$$

Cabe mencionar que en ausencia del potencial de confinamiento, el potencial delta regularizado en el caso de longitudes de dispersión positivas, da lugar a un sólo estado ligado, y la correspondiente energía  $1/\alpha^2$  tiende a  $\infty$  conforme  $\alpha \rightarrow 0$ .

## 4.6 Comparación entre los potenciales de interacción de corto alcance y el potencial delta regularizado.

En las secciones anteriores se ha descrito el problema de dos cuerpos con dos diferentes potenciales de interacción. Utilizando un potencial de corto alcance como lo es el potencial exponencial y posteriormente utilizando el potencial delta regularizado, que tiene una solución analítica. En la presente sección se hace una comparación del espectro de energías de ambos sistemas.



**Figura 4.8:** Energía como función del alcance del potencial para  $\alpha = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$ , se ilustra el límite cuando el alcance del potencial tiende a cero. La línea sólida es el ajuste del polinomio de segundo orden.

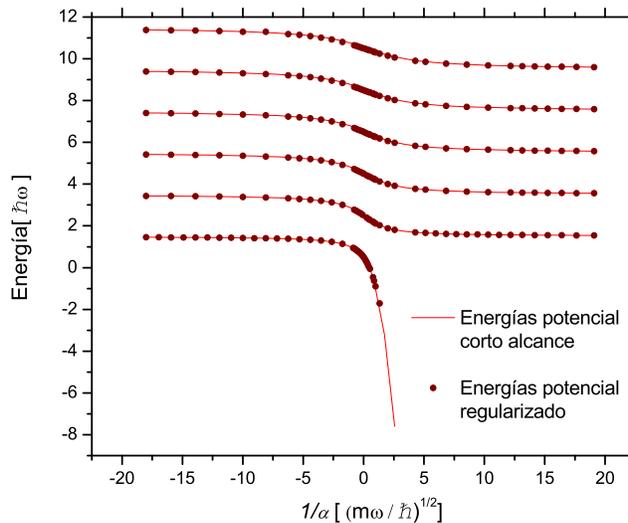
La comparación entre nuestros resultados y aquellos obtenidos por Busch *et. al.* se puede hacer de la siguiente manera: Para un valor dado de la longitud de dispersión, se calculan las energías del potencial delta regularizado utilizando la Ec. (4.43) y para el potencial exponencial se resuelve numéricamente la Ec. (4.25) y se comparan estas energías. Por ejemplo, para  $\alpha = 0.581\sqrt{\hbar/m\omega}$ , para el potencial delta regularizado se obtiene un valor de la energía del estado base  $\mathcal{E}_0 = -2.9217\hbar\omega$ , mientras que para el potencial exponencial se obtiene  $E_0 = -3.2\hbar\omega^4$ , para un alcance de  $r_v = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Al aumentar la intensidad del potencial, la comparación entre un potencial de rango-cero y un potencial de alcance finito ya no es tan adecuada, por ejemplo, para un alcance de  $r_v = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$ , considerando un valor de la longitud de dispersión  $\alpha = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$ , la energía del sistema atrapado con el potencial de interacción delta regularizado es  $\mathcal{E}_0 = -73.04\hbar\omega$ , *versus*  $E_0 = -115.0389\hbar\omega$  para el potencial exponencial. Con el fin de obtener resultados que se aproximen a los de una interacción de contacto, se deben considerar

<sup>4</sup>Estos datos se pueden ver en las Tablas 4.1 y 4.2.

valores del alcance del potencial menores, es decir, tomar el límite cuando el alcance del potencial tiende a cero. Por ejemplo, para un valor de la longitud de dispersión  $\alpha = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$ , se calcula la energía para diferentes valores de  $r_v$  obteniendo así: para  $r_v = 0.01\sqrt{\hbar/m\omega}$ ,  $E_0 = -99.260395\hbar\omega$ , y para  $r_v = 0.075$ ,  $E_0 = -91.940596\hbar\omega$ .

Para poder obtener el valor de la energía en el límite cuando el alcance del potencial tiende a cero,  $r_v \rightarrow 0$ , para un valor de la longitud de dispersión fijo, se calcula el valor de la energía para diferentes valores del alcance del potencial, posteriormente se hace un ajuste a los resultados utilizando un polinomio de segundo orden. Por ejemplo, en la Figura 4.8 se muestra la energía como función del alcance del potencial, para  $\alpha = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Los círculos corresponden a los resultados numéricos y la línea sólida al ajuste del polinomio de segundo orden. En este caso, se obtiene el valor de  $E_0 = -72.8468\hbar\omega$  en el límite  $r_v \rightarrow 0$ , dicho resultado concuerda con la energía del potencial delta regularizado mencionada anteriormente ( $\mathcal{E}_0 = -73.04\hbar\omega$ ). Para los valores mostrados en las Tablas 4.1 y 4.2, los valores de la energía para los estados excitados  $E_i, i \geq 1$ , coinciden en al menos tres cifras significativas con los resultados analíticos del potencial delta regularizado.

En la Figura 4.9, se muestra tanto el espectro de energías para el potencial exponencial, que corresponde a la línea sólida, como para el potencial regularizado, que corresponde a los círculos, lo cual nos muestra que al hacer la comparación de energías, nuestros resultados numéricos son compatibles con la ecuación (4.43).



**Figura 4.9:** Comparación del espectro de energías para el sistema de dos partículas confinadas con diferentes potenciales de interacción. La línea sólida corresponde a la interacción exponencial de corto alcance mientras que los círculos al potencial delta regularizado.

# CAPÍTULO 5

## Gases de Fermi interactuantes y atrapados.

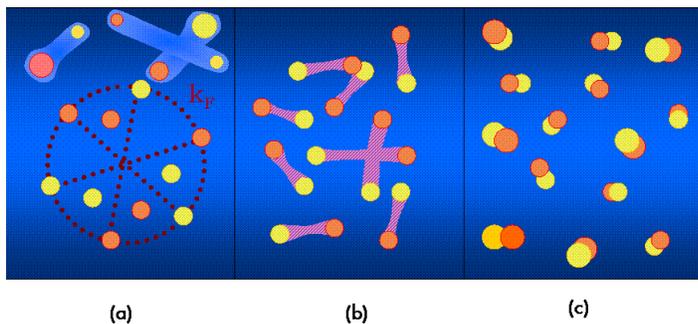
Las interacciones entre los átomos fermiónicos pueden producir estados ligados, los cuales pueden formar pares de partículas conocidos como pares de Cooper o estados ligados de dos átomos que formen un estado molecular y que se comporten como bosones, dependiendo de la intensidad de la interacción. Estos pares de fermiones surgen debido a que una interacción atractiva en un gas de Fermi siempre lleva a la formación de pares de Cooper como un efecto estrictamente de muchos cuerpos. Esto fue mostrado por primera vez por Bardeen, Cooper y Schrieffer en 1957, en su teoría de la superconductividad, conocida como Teoría BCS, para un gas de electrones en metales.

En el presente capítulo se describen las características del gas en las regiones BCS, BEC y el cruce BEC-BCS, así como el modelo del sistema que se utiliza para estudiar un gas de Fermi de dos componentes en onda- $s$ , interactuante y confinado. En la primera sección se describe brevemente el gas de Fermi de dos componentes tanto en el régimen de interacción débil como fuerte. En la sección dos, se presenta el modelo empleado para estudiar el sistema. En la última sección se describe el método Monte-Carlo Variacional así como el algoritmo de Metrópolis en el cual se basó la simulación numérica para obtener las eigenfunciones y eigenenergías del sistema. Dependiendo de la región a analizar, ya sea el límite BCS, BEC o el cruce entre estas regiones, se proponen diferentes tipos de funciones de onda prueba. La construcción de estas funciones de onda también se presenta en la última sección, y se basa en la función de onda solución del problema dos partículas y/o en las correlaciones de las mismas.

## 5.1 Gas de Fermi de dos componentes en onda- $s$ .

Para poder estudiar los gases de Fermi interactuantes y confinados en el caso de onda- $s$ , tanto experimental como teóricamente, debido al principio de exclusión de Pauli, se utilizan mezclas de fermiones de dos componentes, representados por diferentes estados hiperfinos o diferentes espines ( $\uparrow$ ,  $\downarrow$ ). Estos gases son estables, a pesar que el gas atómico presenta excitaciones vibracionales altas, y las moléculas formadas a partir de éstos poseen una vida media larga, como en el caso del litio ( $\text{Li}_2$ ) [22]. Para un gas de Fermi en onda- $p$ , éste puede ser sólo de una componente de espín, que es como se realiza experimentalmente [141], lo cual es posible debido a las diferentes proyecciones del número cuántico  $m_j$ .

En los gases atómicos ultrafríos, se pueden caracterizar tres regiones, conocidas como el límite BCS, límite BEC y el cruce, cada una está definida por la interacción de las partículas. En el regimen BCS, hay formación de pares de Cooper, y la interacción es débil, también hay correlación entre estos pares y la longitud de dispersión es negativa. El régimen BEC, indica una región donde los pares de Cooper ya formaron moléculas, las cuales pueden llegar a un estado de condensación de Bose y la longitud de dispersión es positiva. La tercer región corresponde al cruce, y se caracteriza porque las partículas interactúan fuertemente. En la figura 5.1 se muestra un esquema de estas tres regiones.



**Figura 5.1:** Regiones que tiene un gas de Fermi dependiendo de la interacción entre las partículas. (a) Región BCS, donde hay formación de pares de Cooper. (b) Región del cruce donde los átomos interactúan fuertemente. (c) Región BEC, donde se forma el condensado molecular.

A continuación se da una breve descripción de la teoría que describe cada región dependiendo de la intensidad de la interacción.

### 5.1.1 Gas de Fermi con interacción débil.

Como se mencionó en el Capítulo 3, un gas de fermiones no interactuantes en equilibrio térmico está descrito por la distribución de Fermi-Dirac, como no hay interacciones entre los fermiones, en ese gas no hay condensación de Bose-Einstein o algún fenómeno similar [142]. En el caso de un gas de átomos fermiónicos diluido, puede existir una interacción

atractiva entre pares de fermiones, lo suficientemente fuerte para que se forme por lo menos un estado molecular, en el canal de onda-*s*, dicho estado molecular se comportará como bosón, y si el gas es lo suficientemente diluido, a primera aproximación, las interacciones moleculares pueden despreciarse, por lo que se espera que se forme un condensado de Bose-Einstein de moléculas a una temperatura crítica dada por:

$$k_B T_C \approx 3.31 \left( \frac{n}{g_s} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m}, \quad (5.1)$$

donde  $g_s$  es la degeneración del espín,  $n$  y  $m$  son ahora la densidad y masa respectivamente de las moléculas,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T_C$  es la temperatura crítica. Esta temperatura, salvo por un factor del orden de uno, es la temperatura de Fermi que hubiera caracterizado los átomos en ausencia de interacciones.

La superfluidez es otro fenómeno que ocurre en los bosones cuando la temperatura es la temperatura de degeneración, es decir, la temperatura  $T$  a la cual la distancia entre partículas  $n^{-1/3}$ , a una densidad  $n$ , es comparable a la longitud de dispersión térmica de de Broglie

$$\lambda_B = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}},$$

donde  $m$  es la masa de las partículas. Por ejemplo, en el Helio líquido la temperatura de transición es  $T_{BEC} \sim \frac{2\pi\hbar^2}{m} n^{2/3} \approx 3K$  a una densidad típica de  $n = 10^{22} \text{cm}^{-3}$ , la cual coincide con la observada en el punto de transición al estado superfluido, conocido como punto lambda [94]; mientras que para los gases de Fermi la temperatura de degeneración es la temperatura de Fermi  $T_F \equiv E_F/k_B T$ , aunque la temperatura a la que ocurre la superfluidez es menor que ésta. La característica per se de un estado superfluido, es mostrar una ocupación macroscópica de un solo estado cuántico, como lo son los vórtices o un fluido sin fricción; sin embargo, la manifestación de estos efectos depende del sistema en cuestión, por ejemplo si es eléctricamente cargado es un superconductor, o si es neutro un superfluido [143]. Experimentalmente, una muestra de la superfluidez en un gas de Fermi que interactúa débilmente es la expansión anisotrópica del gas, así como la formación de vórtices, esta última tanto en los gases de Fermi como en los de Bose.

Los fenómenos de superconductividad y de superfluidez han tenido gran auge desde el principio del siglo veinte [31, 143]. En 1911, se descubrió la superconductividad en mercurio por Heike Kamerlingh Onnes, cuando la resistencia eléctrica de éste fue cero a una temperatura crítica de  $T_C = 4.2K$ . A pesar de que el  $^4\text{He}$  fue utilizado en ese descubrimiento, la fase superfluida del helio no fue revelada sino hasta el año de 1930, obteniendo una temperatura del punto de transición a superfluido (punto- $\lambda$ ) de  $T_\lambda = 2.2K$ . Tiempo después, se encontró que el  $^3\text{He}$ , el isótopo del Helio que es un fermión, también presenta la fase superfluida, aunque a una temperatura más baja que la del  $^4\text{He}$ . En el año de 1950, al analizar los electrones de un metal, se encontró la existencia de una interacción atractiva entre los electrones, la cual estaba mediada por las vibraciones de la

red cristalina<sup>1</sup> y que posteriormente se estableció que es la responsable del fenómeno de la superconductividad. Esta interacción atractiva debe ser mayor que la interacción repulsiva de Coulomb. Los efectos debidos a las vibraciones de la red se ven reflejados en el efecto isótopo, el cual fue predicho por Frölich, y consiste en que la temperatura crítica de un superconductor convencional depende de la masa de los iones que constituyen el material. Este efecto se hace evidente cuando se reemplaza un cierto porcentaje de átomos en una muestra por un isótopo del mismo átomo, obteniendo que la temperatura crítica,  $T_C$ , cambia como el inverso de la raíz cuadrada de la masa del isótopo,  $M$ , ( $T_C \propto 1/\sqrt{M}$ ).

En 1956, L. N. Cooper demostró que si se tienen dos electrones que interactúan atractivamente, aunque esta interacción sea pequeña, el mar de Fermi de los electrones se vuelve inestable<sup>2</sup> y se produce un estado ligado conocido como par de Cooper [144]. Los electrones que forman el par tienen momentos y espines opuestos. Una característica de estos pares de Cooper es que son más grandes que la distancia entre partículas, por lo que una colección de estos pares se traslapan en el espacio, y es difícil saber cuales interacciones entre pares se desprecian y cuales no.

En 1957 Bardeen, Cooper y Schrieffer, desarrollaron la primer teoría microscópica de la superconductividad [145, 146], conocida actualmente como teoría BCS en honor a sus autores, donde partieron de un nuevo estado base estable en la cual la formación de pares está contenida de forma autoconsistente [146]. Usando una interacción efectiva entre electrón-electrón mediada por fonones, la cual es atractiva para energías menores que  $k_B T_D$ , ( $T_D$  es la temperatura de Debye), ellos encontraron que la energía de ligadura del par es  $E_{B_{par}} = 2k_B T_D e^{-1/\rho_F |V|}$ , donde  $\rho_F = m_e k_F / 2\pi^2 \hbar^2$  es la densidad de estados en la energía de Fermi,  $m_e$  es la masa de los electrones, y suponen que  $\rho_F |V|$  es menor que uno. La teoría BCS parte de un hamiltoniano con un término atractivo y un estado fundamental formado por parejas de electrones y a partir de este hamiltoniano es posible obtener expresiones para la temperatura crítica, el efecto isotópico y para la brecha<sup>3</sup> de energía [147, 148]. Para romper un par de electrones ligados, hay que suministrar una energía igual o mayor que la brecha de energía. A continuación se explica con más detalle el concepto de apareamiento de fermiones introducido por Cooper y la teoría BCS.

## Apareamiento de Fermiones

En un metal los electrones de conducción son aquellos que pueden circular libremente en la red cristalina formada por los iones. Si se considera que a primera aproximación los electrones son libres, estos poseen una energía de la forma  $p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$ , la cual no depende de la dirección. El estado de máxima energía, conocida como energía de Fermi,  $E_F$ , estará ocupado por todos los electrones que quepan sobre la superficie de una esfera de radio  $\hbar k_F = \sqrt{2mE_F}$ , a esa superficie se le conoce como superficie de Fermi. La energía de

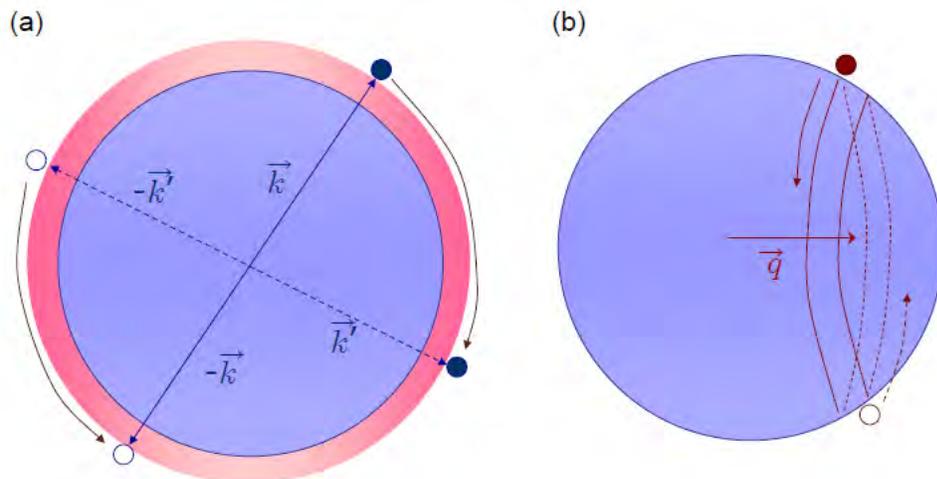
<sup>1</sup>En este caso los mediadores son los fonones, que son los modos de vibración de la red.

<sup>2</sup>En este caso inestable quiere decir que existe otro estado físico que puede tener una energía menor.

<sup>3</sup>En inglés, gap.

Fermi define el momento de Fermi  $k_F = \sqrt{2mE_F}/\hbar$ ; a la esfera que ocupan los electrones de conducción que tienen energías que van desde cero hasta la máxima energía posible del metal se le conoce como esfera de Fermi [147].

Como se mencionó en la sección anterior, Cooper consideró dos fermiones de espín 1/2 que interactúan débilmente en la superficie de mar de Fermi y que forman un estado ligado apareado, el estado base es el par de Cooper. Los estados cuyo momento es menor que el de la superficie de Fermi no están permitidos, mientras que para interacciones débiles, los momentos de las partículas están confinados a un estrecho cascarón por encima de la superficie de Fermi. Cuando los pares de Fermi tienen momento cero, éstos se pueden dispersar en toda la superficie de Fermi, como se muestra en la Figura 5.2(a). Si los pares tienen un momento del centro de masa finito  $q$ , los estados que contribuyen a la dispersión se reducen a un círculo como se muestra en la Figura 5.2(b). Por lo que los pares con momento cero son los que se ligan más fuerte.



**Figura 5.2:** Dos partículas que se dispersan en la superficie del mar de Fermi. En (a), la esfera interior es la esfera de Fermi. Las partículas que interactúan débilmente son aquellas que tienen momentos iguales y opuestos y sólo se pueden dispersar en un pequeño cascarón (indicado por la franja exterior de la esfera) por encima de la esfera de Fermi. (b) Las partículas con momento total diferente de cero, por ejemplo  $2q$ , se pueden dispersar sólo en una banda estrecha alrededor de un círculo de radio  $\sqrt{k_F^2 - q^2}$

Para poder calcular la energía del par de Cooper, se puede escribir el hamiltoniano del sistema en segunda cuantización o utilizar la ecuación de Schrödinger escrita de tal forma que muestre la formación de estados ligados y que depende de la densidad de estados, donde se busca una energía de ligadura  $E_B = E - 2E_F < 0$  en la parte superior de mar de Fermi. Usando esta última aproximación, la ecuación para la energía de ligadura  $E_B$  es [94]:

$$-\frac{1}{V_0} = \frac{1}{\Omega} \int_{E_F < \epsilon < E_F + E_R} \frac{\rho_{3D}(\epsilon)}{2(\epsilon - E_F) + |E_B|} d\epsilon, \quad (5.2)$$

donde  $E_R = p^2/m$ , es la energía de corte del sistema,  $\Omega$  es el volumen del sistema,  $V_0$  es el potencial de interacción escalado con el alcance del potencial, por lo que tiene unidades de energía por volumen. Para aquellos estados del momento que están por debajo de la superficie de Fermi, el efecto debido al bloqueo de Pauli, se incluye al integrar solamente en las energías donde  $\epsilon > E_F$ .

Para el caso de superconductores convencionales, la energía de corte natural,  $E_R$ , es la dada por la frecuencia de Debye,  $\omega_D$ ,  $E_R = \hbar\omega_D$ . Como  $\hbar\omega_D \ll E_F$ , se puede aproximar  $\rho_{3D}(\epsilon) \approx \rho_{3D}(E_F)$ , obteniendo:

$$-\frac{1}{V_0} = \frac{1}{\Omega} \rho_{3D}(E_F) \int_{E_F < \epsilon < E_F + E_R} \frac{d\epsilon}{2(\epsilon - E_F) + |E_B|}. \quad (5.3)$$

Al integrar la ecuación anterior se obtiene la siguiente expresión para la energía de ligadura:

$$E_B = -2\hbar\omega_D e^{-2\Omega/\rho_{3D}(E_F)|V_0|}. \quad (5.4)$$

En el caso de un gas de átomos de Fermi, se reemplaza el término  $1/V_0$  de la Ec. (5.2) por el potencial de contacto que incluye la longitud de dispersión y un término que balancea el término divergente de la siguiente manera:

$$\frac{1}{V_0} = \frac{m}{4\pi\hbar^2\alpha} - \frac{m}{\hbar^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2}. \quad (5.5)$$

Utilizando la ecuación anterior la ecuación para los estados ligados es:

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2\alpha} = \frac{1}{\Omega} \int_{E_f}^{E_F + E_R} \frac{\rho_{3D}(\epsilon) d\epsilon}{2(\epsilon - E_F) + |E_B|} - \frac{1}{\Omega} \int_0^{E_F + E_R} \frac{\rho_{3D}(\epsilon) d\epsilon}{2\epsilon}, \quad (5.6)$$

para hacer la integral se supone que la energía de corte tiende a infinito  $E_R \rightarrow \infty$ , y que  $|E_B| \ll E_F$  obteniendo

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2\alpha} = \frac{\rho_{3D}(E_F)}{2\Omega} \left( -\ln \left( \frac{|E_B|}{8E_F} \right) - 2 \right), \quad (5.7)$$

como  $\rho_{3D}(E_F) = \frac{\Omega m k_F}{2\pi^2 \hbar^2}$ , se obtiene:

$$E_B = -\frac{8}{e^2} E_F e^{-\pi/k_F|\alpha|}. \quad (5.8)$$

En este análisis se despreció la interacción entre partículas en el mar de Fermi, aún así se puede observar que: Dos fermiones que interactúan por encima del mar de Fermi, forman un estado ligado no importando que tan pequeña sea la interacción. Cuando hay interacciones entre las partículas en el mar de Fermi, el gas se reordenará en un

estado apareado completamente nuevo; por lo que el mar de Fermi es inestable ante el apareamiento, a este fenómeno se le conoce como inestabilidad de Cooper o inestabilidad de los pares de Cooper.

Para concluir la sección se mencionará brevemente la función de onda del par de Cooper, así como el hamiltoniano correspondiente. Para poder escribir la función de onda recordemos que los pares de Cooper están formados por electrones con espines opuestos. Al aplicar el operador  $c_{k\uparrow}^+$  al estado base del nivel de Fermi  $|0\rangle$  se crea un electrón con momento  $\hbar k$ , ese nuevo electrón tiene momento (número cuántico)  $k$  y espín  $1/2$ . Si se aplica  $c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+$ , al estado  $|0\rangle$  se tiene la creación de un par de electrones con momentos  $+k_{\uparrow}$  y  $-k_{\downarrow}$  y energía mayor a la energía de Fermi, obteniendo así un par de electrones sobre el nivel de Fermi que se atraen; por lo que se espera que la función de onda sea una combinación de  $c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ |0\rangle$  [147]:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k, k > k_F} \alpha_k c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ |0\rangle. \quad (5.9)$$

El hamiltoniano que describe la interacción atractiva entre electrones y cuya solución es la función de onda dada por la Ec. (5.9) es:

$$H = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k, \sigma}^+ c_{k, \sigma} - \sum_{k, k'} V_{k, k'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}. \quad (5.10)$$

El primer término cuenta el número de estados ocupados por electrones, el segundo término describe como interactúan los electrones para formar los pares de Cooper (se destruyen los dos electrones que forman un par de Cooper y se crea un nuevo par de Cooper). El potencial que propicia estos eventos es  $V_{k, k'}$ . Al calcular el valor medio del hamiltoniano de la ecuación anterior<sup>4</sup> se obtiene la siguiente expresión:

$$E = 2E_F + \frac{2\hbar\omega_D}{1 - e^{-\frac{2}{N(0)V}}}, \quad (5.11)$$

donde  $N(0)$  es la densidad de estados al nivel de Fermi para una dirección de espín y  $E_F$  es la energía de Fermi.

A partir de la ecuación anterior se pueden considerar dos límites de la energía, los cuales se conocen como acoplamiento débil y acoplamiento fuerte. El acoplamiento débil es aquél donde  $N(0)V \ll 1$ ; en este caso la Ec. (5.11) se reduce a

$$E = 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(0)V}}. \quad (5.12)$$

Dos electrones de la banda de conducción cuyos estados energéticos están sobre la esfera de Fermi, tienen energía igual a  $2E_F$ . La energía de un par de Cooper es menor que la energía de Fermi y la energía necesaria para romper el par de Cooper está dada por:

<sup>4</sup>Los cálculos no se hacen explícitamente en esta tesis, pero para más detalles se puede consultar cualquier texto sobre superconductividad, por ejemplo, la referencias [147, 148]

$$E_p = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(0)V}}. \quad (5.13)$$

Mientras que en el límite de acoplamiento fuerte  $N(0)V \gg 1$ , la energía es:

$$E = 2E_F - N(0)V\hbar\omega_D. \quad (5.14)$$

La ecuación anterior muestra explícitamente que la energía de un par de Cooper es menor que cuando los dos electrones están libres sobre la esfera de Fermi. Esto inclinó a Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) a pensar que la formación de los pares de Cooper podría ser parte fundamental de la superconductividad; ellos describieron el problema de muchos cuerpos de ese estado apareado, que incluye la correspondiente antisimetrización de la función de onda como se muestra en la referencia [146]. La inclusión autoconsistente de todos los pares de fermiones lleva a un mayor espacio de momentos disponible para el apareamiento. La descripción de esta teoría se muestra en la siguiente sección.

### Revisión de Teoría BCS

En la teoría BCS se supone fundamentalmente que los electrones se atraen y que las interacciones van de estado de par a estado de par. El hamiltoniano de esta teoría incluye un término de la interacción electrón-fonón que bajo ciertas condiciones, conduce a una interacción atractiva entre electrones. El hamiltoniano de la Teoría BCS, considerando solamente pares de Cooper, se puede escribir de la siguiente forma:

$$H_{BCS} = \sum_k \epsilon_k (c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^+ c_{-k\downarrow}) - \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k'\uparrow}^+ c_{-k'\downarrow}^+ c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}.$$

La interacción  $V_{k,k'}$  incluye tanto el término de la repulsión de Coulomb entre los electrones como la interacción entre iones y electrones que culmina en una interacción atractiva, por lo cual este término es positivo, y aunque esta interacción sea pequeña, conduce a un cambio fundamental en los electrones o en un grupo de electrones. Este cambio es abrupto, es una transición de fase que no se puede considerar como una perturbación del estado normal descrito por electrones de conducción.

Una forma para encontrar la energía para el estado base de la Ec. (5.15), es utilizando el método variacional, donde se propone una función de onda  $\psi_V$ , se calcula el valor medio del hamiltoniano  $\langle \psi_V | H | \psi_V \rangle$ , y se minimiza respecto al parámetro variacional  $\lambda$  [149]. Otro camino, que es el que se presentará a continuación, consiste en diagonalizar el hamiltoniano BCS, por medio de una transformación canónica (que no cambia los valores propios de la energía de los estados del sistema), conocida como transformación de Valatin-Bogoliubov [94, 147, 148]. Los operadores de la transformación canónica son:

$$\gamma_k = u_k c_k - v_k c_{-k}^+, \quad (5.15)$$

$$\gamma_{-k} = u_k c_{-k} + v_k c_k^+; \quad (5.16)$$

siendo los respectivos operadores conjugados:

$$\gamma_k^+ = u_k c_k^+ - v_k c_{-k}, \quad (5.17)$$

$$\gamma_{-k}^+ = u_k c_{-k}^+ + v_k c_k, \quad (5.18)$$

En las ecuaciones anteriores se utilizaron las siguientes definiciones  $k \equiv k_\uparrow$  y  $-k \equiv -k_\downarrow$ ;  $u_k$  y  $v_k$  son funciones reales simétricas respecto a la transformación  $k \rightarrow -k$ . Esta transformación canónica es unitaria, por lo que los coeficientes  $u_k$  y  $v_k$  obedecen la siguiente condición:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (5.19)$$

Los nuevos operadores  $\gamma$  satisfacen las reglas de conmutación de los fermiones:

$$\{\gamma_k, \gamma_{k'}\} = \{\gamma_k, \gamma_{-k'}\} = \{\gamma_k^+, \gamma_{-k'}\} = 0 \quad (5.20)$$

$$\{\gamma_k^+, \gamma_{k'}\} = \{\gamma_{-k}^+, \gamma_{-k'}\} = \delta_{k,k'}. \quad (5.21)$$

A partir de las ecuaciones (5.15-5.18) se obtienen las expresiones para los operadores  $c_k$ ,  $c_k^+$ ,  $c_{-k}$ ,  $c_{-k}^+$  las cuales son:

$$c_k = u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^+, \quad (5.22)$$

$$c_k^+ = v_k \gamma_{-k} + u_k \gamma_k^+, \quad (5.23)$$

$$c_{-k} = u_k \gamma_{-k} - v_k \gamma_k^+, \quad (5.24)$$

$$c_{-k}^+ = u_k \gamma_{-k}^+ - v_k \gamma_k. \quad (5.25)$$

Al escribir el hamiltoniano BCS, Ec. (5.15), en términos de los operadores definidos anteriormente, se pueden reconocer dos términos. El hamiltoniano de la energía cinética  $H_C$ , y el hamiltoniano de la energía potencial que incluye la interacción  $H_V$ , los cuales son explícitamente:

$$H_C = \sum_k \epsilon_k (c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^+ c_{-k\downarrow}), \quad (5.26)$$

$$H_V = - \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k'\uparrow}^+ c_{-k'\downarrow}^+ c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}. \quad (5.27)$$

Utilizando las ecuaciones Ecs. (5.22-5.25), las reglas de conmutación, Ecs. (5.20) y (5.21) y definiendo los siguientes operadores:

$$m_k = \gamma_k^+ \gamma_k \quad \text{y} \quad m_{-k} = \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k}; \quad (5.28)$$

los hamiltonianos de la energía cinética y de la energía potencial son:

$$H_C = \sum_k \epsilon_k [2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}) + 2u_k v_k (\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k)], \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned}
H_V = & - \sum_{k,k'} V_{k,k'} [u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (1 - m_k - m_{-k}) \\
& + u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+) \\
& + \text{términos de cuarto orden}].
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Utilizando las dos ecuaciones anteriores el hamiltoniano Ec. (5.15) es:

$$\begin{aligned}
H_{BCS} = & \sum_k \epsilon_k [2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}) + 2u_k v_k (\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k)] \\
& - \sum_{k,k'} V_{k,k'} [u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (1 - m_k - m_{-k}) \\
& + u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+) \\
& + \text{términos de cuarto orden}].
\end{aligned} \tag{5.31}$$

El hamiltoniano anterior se puede ver como si estuviera formado por cuatro términos; el primero es un término constante e independiente de los operadores  $\gamma$  que se conocerá como  $\tilde{E}_0$  y que corresponde a la energía del estado fundamental, la cual es:

$$\tilde{E}_0 = \sum_k 2\epsilon_k v_k^2 - \sum_{k,k'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k. \tag{5.32}$$

El segundo término que se denotará como  $H_0$  es un operador diagonal porque sus términos o son constantes o dependen sólo de uno de los operadores  $m$

$$\begin{aligned}
H_0 = & \sum_k \epsilon_k (u_k^2 - v_k^2) (m_k + m_{-k}) \\
& + \sum_{k,k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (m_{k'} + m_{-k'}) \\
& + \sum_{k,k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (m_{k'} + m_{-k'}).
\end{aligned}$$

El tercer término que se denotará como  $H_1$ , es un término no diagonal que contiene el producto de dos operadores de Fermi

$$H_1 = \sum_k [2\epsilon_k u_k v_k - \sum_{k,k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2)] (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+); \tag{5.33}$$

el último término involucra los términos de cuatro operadores en  $\gamma$ , dicho término se desprecia porque contribuye muy poco a la energía del estado base para  $T = 0K$ .

Para encontrar la transformación de Bogoliubov apropiada, es necesario encontrar la relación entre los coeficientes  $u_k$  y  $v_k$ , para lo cual se supone que no hay estados excitados con energía mayor a la energía de Fermi, lo que implica que para el estado de mínima energía los números de ocupación  $m_{k'}$  y  $m_{-k'}$  son cero; esta situación sólo se cumple a  $T = 0$ . Al imponer la condición que la energía  $\tilde{E}_0$  sea la energía del estado fundamental, es decir, que se cumpla que  $\frac{\partial \tilde{E}_0}{\partial v_k} = 0$  se llega a la siguiente relación

$$2\epsilon_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} = 0, \quad (5.34)$$

que es la condición que anula el término  $H_1$  y por lo tanto diagonaliza el hamiltoniano. A continuación se buscan las formas de las funciones  $u_k$  y  $v_k$  que satisfagan la ecuación (5.34), como estas funciones no son independientes se proponen de la siguiente manera:

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} - x_k} \quad \text{y} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} + x_k}, \quad (5.35)$$

utilizando las definiciones de la ecuación anterior, la Ec. (5.34) es:

$$2\epsilon_k \left( \frac{1}{4} - x_k^2 \right)^{1/2} = -2x_k \Delta_k; \quad (5.36)$$

obteniendo así el siguiente valor para  $x_k$ :

$$x_k = \pm \frac{\epsilon_k}{2(\epsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}}. \quad (5.37)$$

Se define la brecha de energía como:

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'}, \quad (5.38)$$

utilizando las funciones propuestas para  $u_k$  y  $v_k$  se tiene:

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{kk'} \left( \frac{1}{4} - x_{k'}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (5.39)$$

sustituyendo la Ec. (5.37) en la ecuación anterior se llega a la siguiente ecuación para la brecha de energía  $\Delta_k$ :

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad (5.40)$$

La ecuación anterior es una ecuación no lineal, la cual se puede escribir en forma integral al emplear la relación

$$\sum \rightarrow D(\epsilon_{k'}) d\epsilon_{k'},$$

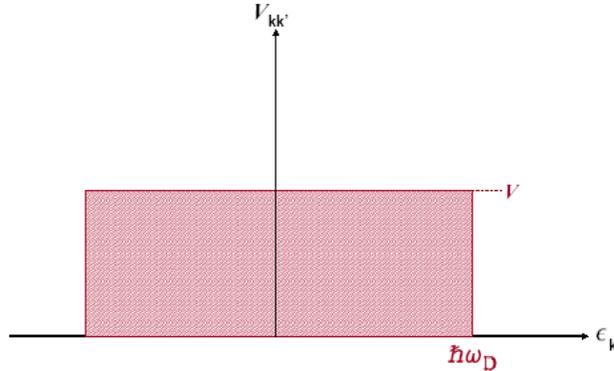
para obtener así la forma integral de la ecuación para la brecha de energía del estado superconductor:

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon_{k'}) V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{(\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2)^{1/2}} d\epsilon_{k'}, \quad (5.41)$$

donde  $D(\epsilon_{k'})$  es la densidad de estados para una sola partícula para una cierta dirección de espín. El valor de  $\Delta_k$  depende del espectro de energía  $\epsilon_k$  de los estados de una sola partícula (electrones sin interacción), calculados respecto al nivel de Fermi y de las funciones  $V_{kk'}$ , las cuales están dadas por la fuerza de interacción atractiva entre los electrones. La solución trivial para la ecuación (5.40) es cuando  $\Delta_k = 0$ ; lo que implica que no hay atracción entre electrones y en este caso se describe el estado normal. Para una interacción general, la Ec. (5.40) se debe de resolver de forma numérica; el modelo más simple para el potencial  $V_{kk'}$  es aquel propuesto en la teoría BCS [146], el cual se define de la siguiente forma:

$$V_{kk'} = \begin{cases} V & \text{si } |\epsilon_k| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (5.42)$$

donde  $V$  es constante,  $\hbar\omega_D$  es la energía de Debye. El potencial de la ecuación anterior se muestra en la Figura 5.3. Se utiliza la aproximación que  $D(\epsilon_{k'})$  es una constante e igual a la densidad de estados al nivel de Fermi para una dirección dada de espín, es decir  $D(\epsilon_{k'}) = N(0)$ ; por lo que la expresión integral para la brecha de energía en este caso es:



**Figura 5.3:** Potencial de interacción atractivo de dos electrones, propuesto en la Teoría BCS.

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} N(0)V \frac{\Delta_{k'}}{(\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2)^{1/2}} d\epsilon_{k'}. \quad (5.43)$$

Debido a que en la ecuación anterior la brecha de energía ya no depende de  $k$  se puede hacer la sustitución  $\Delta_k = \Delta$  y  $\epsilon_k = \epsilon$ , por lo que la Ec. (5.43) queda de la siguiente manera:

$$1 = \frac{1}{2} N(0)V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{(\epsilon^2 + \Delta^2)^{1/2}} d\epsilon, \quad (5.44)$$

integrando la ecuación anterior se obtiene una expresión para la brecha de energía para el potencial propuesto por la Teoría BCS:

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh\left[\frac{1}{N(0)V}\right]}. \quad (5.45)$$

En la aproximación de acoplamiento débil,  $N(0)V \ll 1$  se obtiene:

$$\Delta = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}; \quad (5.46)$$

La ecuación anterior muestra un estado de energía con energía menor que la del estado normal donde  $\Delta = 0$ , como consecuencia, se forma una brecha en el espectro electrónico cuyas características determinan el comportamiento dinámico del superconductor.

En el caso, donde el potencial  $V_{kk'}$  depende de la longitud de dispersión, se obtiene una expresión para la brecha de energía, en el límite de acoplamiento débil  $k_f\alpha \rightarrow 0^-$ , análoga a la Ec. (5.46):

$$\mu \approx E_F, \quad (5.47)$$

$$\Delta \approx \frac{8}{e^2} e^{\frac{-\pi}{2k_F|\alpha|}}. \quad (5.48)$$

La primera ecuación indica que añadir una partícula de espín hacia abajo y una de espín hacia arriba cuesta una energía de Fermi por partícula, suponiendo que se añaden ambas partículas de espín hacia arriba y de espín hacia abajo da una energía de  $2\mu$ . En el límite BCS de interacción débil, el bloqueo de Pauli domina sobre las interacciones y por lo tanto las partículas sólo se pueden añadir en la superficie de Fermi. La segunda ecuación es el resultado clásico de la teoría BCS para el gap. La energía para el estado base BCS es [94]:

$$E_{BCS} = \frac{3}{5}NE_F - \frac{1}{2}\rho(E_F)\Delta^2. \quad (5.49)$$

El primer término es la energía del estado normal no interactuante, donde  $3/5E_F$  es la energía cinética promedio por fermión en el mar de Fermi. El segundo término es la energía debido a la condensación, la cual es negativa, esto indica que el estado BCS es energéticamente favorable comparado con el estado normal.

### 5.1.2 Gases de Fermi con interacción fuerte.

En esta sección se describirá un gas de fermiones interactuante pero no confinado por una trampa sino que se encuentra encerrado en una caja de volumen  $V$ . La idea principal es, proponer una función de onda de pares de fermiones que describa el gas tanto en la región BCS, como en la región BEC. Para esta descripción se seguirá principalmente el trabajo realizado por Leggett [78], así como las ideas planteadas por Eagles [77] y Blatt [148].

Estas ideas se utilizarán en nuestro trabajo cuando consideramos que los átomos están confinados.

El sistema a estudiar consiste de  $N$  fermiones de espín  $1/2$ , los cuales se encuentran en un volumen  $V$  e interactúan por medio de un potencial central  $U(r)$  el cual posee las siguientes características:

- (1) A cortas distancias es repulsivo aunque no infinitamente repulsivo en el origen.
- (2) A grandes distancias tienen una parte atractiva hasta un cierto rango finito  $\ell_0$ .
- (3) La integral  $\int U(r)d^3r$  es finita y positiva.
- (4) Existe la transformada de Fourier  $\int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}U(r)d^3r$  y decae lo suficientemente rápido cuando  $|k| \rightarrow 0$ .
- (5) Los parámetros del potencial  $U(r)$  son tales que sus valores están próximos a aquellos valores para los cuales se pueden ligar dos partículas.

La condición (5) implica que la longitud de dispersión,  $\alpha$ , es grande comparada con el alcance del potencial  $\ell_0$ . Un ejemplo de cómo sería una forma para el potencial descrito con las propiedades mencionadas (1-5), es aquel formado por una barrera para  $0 < r < \ell_1$  y un pozo cuadrado para  $\ell_1 < r < \ell_0$ . En el caso que no existan interacciones entre partículas, y a temperatura cero  $T = 0$ , la longitud característica del sistema es el inverso del momento de Fermi  $k_F = (3g_s\pi^2N/V)^{2/3}$ , donde  $g_s = 2$  es la degeneración debida al espín. Dado que  $\alpha \gg \ell_0$  todas las propiedades de la dispersión del sistema de partículas para momentos tales que  $k \ll \ell_0$  se expresan en términos de  $\alpha$ ; despreciando los detalles generales del potencial. Por lo tanto, para  $k_F\ell_0 \ll 1$  todas las propiedades del sistema se expresan en términos de un parámetro adimensional el cual es

$$\frac{1}{k_F\alpha}.$$

El hamiltoniano del sistema descrito anteriormente es:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p^2}{2m} + \sum_{i<j} U(r_{ij}), \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|. \quad (5.50)$$

Para resolver este sistema, se utiliza el método variacional, en el cual se calcula la energía del sistema a partir de la relación

$$E = \frac{\langle \psi_L | H | \psi_L \rangle}{\langle \psi_L | \psi_L \rangle};$$

donde  $|\psi_L\rangle$  es una función de onda de prueba la cual se construye a partir pares de fermiones. Para poder plantear esta función, primero se considera un estado de dos fermiones, el cual puede ser descrito por la función

$$\tilde{\Phi}(\xi_1, \xi_2) = C e^{i\vec{K} \cdot \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}} \tilde{\varphi}(\xi_1, \xi_2), \quad (5.51)$$

donde  $\tilde{\varphi}(\xi_1, \xi_2)$  denota la función de la coordenada relativa,  $C e^{i\vec{K} \cdot \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}}$  la correspondiente al centro de masa,  $\vec{K}$  el vector de onda del centro de masa,  $\xi = (\vec{r}_i, \sigma_i)$  la posición  $\vec{r}_i$  y el espín  $\sigma_i$  de la partícula  $i$ ; una forma para la función de onda para la coordenada relativa es:

$$\tilde{\varphi}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2) \phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|); \quad (5.52)$$

donde  $\phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  es una función de onda que sólo depende de la distancia entre las partículas y esta función  $\phi$ , en principio se considera real y es el parámetro variacional. La parte antisimétrica de la función de onda se encuentra en la parte de espín, pues se cumple que  $\tilde{\varphi}(\xi_1, \xi_2) = -\tilde{\varphi}(\xi_2, \xi_1)$ . Si ahora se consideran cuatro partículas, una propuesta para poder escribir la función de onda que describa a los fermiones y que por lo tanto sea antisimétrica es conocida como función de Schafroth o de Blatt [148]; en el caso de dos pares la función de onda es:

$$\tilde{\Phi}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = \tilde{\varphi}(1, 2)\tilde{\varphi}(3, 4) - \tilde{\varphi}(1, 3)\tilde{\varphi}(2, 4) + \tilde{\varphi}(1, 4)\tilde{\varphi}(2, 3), \quad (5.53)$$

$\tilde{\varphi}(i, j) \equiv \tilde{\varphi}(\xi_i, \xi_j)$ . La función de onda de la Ec. (5.53), es una función de onda que describe dos pares de partículas en el mismo estado del par, es completamente antisimétrica, por lo tanto cumple el principio de exclusión de Pauli. La Ec. (5.53) se puede escribir de la siguiente manera:

$$\tilde{\Phi}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = C_N \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \tilde{\varphi}(1, 2)\tilde{\varphi}(3, 4) \quad (5.54)$$

Considerando la descripción anterior para el caso de dos y cuatro partículas la función de onda prueba para el sistema de  $N$  partículas es:

$$\psi_L(\vec{r}_1\sigma_1 \dots \vec{r}_N\sigma_N) = \mathcal{A} \tilde{\varphi}(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2) \tilde{\varphi}(\vec{r}_3\sigma_3, \vec{r}_4\sigma_4) \dots \tilde{\varphi}(\vec{r}_{N-1}\sigma_{N-1}, \vec{r}_N\sigma_N) \quad (5.55)$$

la cual se puede escribir en términos de las coordenadas  $\xi_i$  de la siguiente manera:

$$\psi_L(\vec{\xi}_1 \dots \vec{\xi}_N) = C_N \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \tilde{\varphi}(\xi_1, \xi_2) \tilde{\varphi}(\xi_3, \xi_4) \dots \tilde{\varphi}(\xi_{N-1}, \xi_N) \quad (5.56)$$

La ecuación anterior describe un estado completamente antisimétrico con  $N$  partículas. La función de onda descrita por las Ecs. (5.55) y/o (5.56) tiene las siguientes características: se reduce a la formación de moléculas diatómicas fuertemente ligadas en el límite que  $1/k_f\alpha \rightarrow \infty$  y al caso de pares de Cooper mencionados en la teoría BCS cuando  $1/k_f\alpha \rightarrow -\infty$ ; estos límites se mostrarán al final de esta sección. Para poder hacer una descripción cualitativa en la región intermedia que es conocida como el cruce BEC-BCS, se utilizará el

procedimiento descrito en la sección anterior sobre la teoría BCS, reemplazando la función descrita en la Ec. (5.52) por la función de onda BCS, pues se describen dos fermiones en dos diferentes estados de espín con momentos opuestos. A continuación se utilizará la siguiente notación  $|+\rangle = \uparrow$  y  $|-\rangle = \downarrow$ ,  $u_k \equiv u_{-k}$ ,  $v_k \equiv v_{-k}$ :

$$\Psi_{BCS_L} = \prod_k (u_k v_k a_k^+ a_{-k}^+) |0\rangle, \quad (5.57)$$

donde  $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ , y  $v_k/u_k = c_k$ . Los coeficientes  $c_k$  son los parámetros variacionales que corresponden a la transformada de Fourier de  $\phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ :

$$c_k \equiv \int d(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}. \quad (5.58)$$

Se utilizará nuevamente el método variacional, considerando que el estado BCS no tiene un número de partículas definido, mas bien no conserva el número de partículas. Se calcula:

$$E = \frac{\langle \psi_{BCS_L} | (\hat{H} - \mu \bar{N}) | \psi_{BCS_L} \rangle}{\langle \psi_{BCS_L} | \psi_{BCS_L} \rangle} = \langle \psi_{BCS_L} | (\hat{H} - \mu \bar{N}) | \psi_{BCS_L} \rangle; \quad \langle \psi_{BCS_L} | \psi_{BCS_L} \rangle = 1 \quad (5.59)$$

$\mu$  es el potencial químico y  $\bar{N} = \langle \psi_{BCS_L} | \sum_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma} | \psi_{BCS_L} \rangle$  y  $\hat{H}$  es el hamiltoniano descrito en la Ec. (5.50) escrito en segunda cuantización, donde se considera que las partículas tienen colisiones entre sí:

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k_1', k_2', \sigma_1, \sigma_2} \langle k_1' k_2' | U(r) | k_1 k_2 \rangle a_{k_1', \sigma_1}^+ a_{k_2', \sigma_2}^+ a_{k_2, \sigma_2} a_{k_1, \sigma_1}, \quad (5.60)$$

donde  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$  es la energía de partícula libre. En la segunda suma se toma en cuenta que  $k_1' + k_2' = k_1 + k_2$ . Al calcular el valor medio descrito por la Ec. (5.59) se consideran todos los términos del hamiltoniano y los posibles valores que puede tomar  $k$  y  $\sigma$  obteniendo:

$$E = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 + 2 \frac{U(0)}{V} \sum_{k, k'} n_k n_{k'} - \frac{1}{V} \sum_{kk'} U(k-k') n_k n_{k'} + \frac{1}{V} \sum_{k, k'} U(k-k') F_k F_{k'}, \quad (5.61)$$

donde  $N = 2 \sum_k n_k$ ,  $n_k = \langle a_{k,\sigma}^+ a_{k,\sigma} \rangle = v_k^2$  es la densidad de partículas y  $F_k = \langle a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ \rangle = u_k v_k$  son los valores esperados del par creado y es conocido como el valor de espectación del par, o como el parámetro de orden, e indica si hay o no formación de pares. El término de la energía de la Ec. (5.61) está constituido por tres contribuciones:

$$E = E_H + E_F + E_{par};$$

con

$$E_H = 2 \frac{U(0)}{V} \sum_{k,k'} n_k n_{k'}, \quad (5.62)$$

$$E_F = -\frac{1}{V} \sum_{kk'} U(k-k') n_k n_{k'}, \quad y \quad (5.63)$$

$$E_{par} = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) n_k + \frac{1}{V} \sum_{k,k'} U(k-k') F_k F_{k'}. \quad (5.64)$$

Los términos de Hartree ( $E_H$ ) y de Fock ( $E_F$ ), dependen de la densidad y del número de partículas, no del parámetro  $F_k$ ; por lo tanto estos términos no contribuyen para el calculo de pares. El término importante es  $E_{par}$ . En el término de Hartree

$$2 \frac{U(0)}{V} \sum_{k,k'} n_k n_{k'} = 2 \frac{U(0)}{V} \frac{N^2}{4} = \frac{1}{2} U(0) \frac{N^2}{V} = \frac{1}{2} U(0) N \frac{N}{V} = \frac{1}{2} U(0) N n, \quad (5.65)$$

se observa que este depende linealmente de la densidad  $n$ , mientras que el término de Fock es autoconsistente poner  $U(k-k') = U(0)$ . Para ver esto se resuelve el problema usando esa igualdad y notando que en el límite de  $|\vec{k}| \ll k_F$ ,  $\alpha^{-1} \ll k \lesssim \ell_0$ , el término de Fock decae como  $n_k \sim k^{-4}$  y además

$$E_F = -\frac{1}{V} \sum_{kk'} U(k-k') n_k n_{k'} = -\frac{1}{V} \sum_{kk'} U(0) n_k n_{k'} = -\frac{1}{V} U(0) \sum_{kk'} n_k n_{k'} = U(0) \frac{N^2}{4}. \quad (5.66)$$

En el límite  $k_F \ell_0 \ll 1$ ,  $\ell_0/\alpha \ll 1$  los términos de Hartree y de Fock contribuyen con una parte de  $1/4 N^2 U(0)$ ; esto indica que el cero del potencial químico está desplazado y no afecta la función de onda, por lo tanto para fines prácticos el término que se minimizará para poder obtener la función de onda adecuada, solamente es el correspondiente a la energía del par. Así que lo que se calcula es

$$\frac{\partial E_{par}}{\partial v_k} = 0; \quad \forall k.$$

Al hacer estos cálculos y utilizar que  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  se obtiene la siguiente ecuación:

$$(\epsilon_k - \mu) F_k = \frac{1}{2V} (v_k^2 - u_k^2) \sum_{k'} U(k-k') F_{k'}. \quad (5.67)$$

Utilizando la ecuación para la brecha de energía definida en la Ec. (5.38) la ecuación anterior es:

$$(\epsilon_k - \mu) u_k v_k = (u_k^2 - v_k^2) \Delta_k, \quad (5.68)$$

A partir de la ecuación anterior y de la relación  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  se obtienen las expresiones para  $u_k$  y  $v_k$ :

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\epsilon_k + \mu}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \right], \quad (5.69)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \right]. \quad (5.70)$$

Al sustituir en la ecuación para la brecha de energía se tiene la siguiente expresión:

$$\Delta_k = -\frac{1}{2V} \sum_{k'} U(|k - k'|) \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad (5.71)$$

Se define

$$E_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}, \quad (5.72)$$

empleando la ecuación anterior se obtiene la siguiente expresión para el número de partículas  $N$

$$N = \sum_k \left( 1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{E_k} \right). \quad (5.73)$$

A partir de la Ec. (5.71) se puede notar lo siguiente: Para  $T = 0$   $\mu \simeq \epsilon_F$ ; por lo que la energía proviene de las partículas que se encuentran en la superficie. Cuando  $k < k_F$  las partículas sienten el bloqueo de Pauli. En  $k = k_F$  hay excitaciones, debido a los pares de partículas que están en la superficie de Fermi. Hay una brecha  $\Delta$  tal que si  $T_k < \Delta$  los pares son estables. El rango en el cual varía el potencial  $U_{kk'}$  es del orden de  $\sim \ell_o^{-1}$ . Dado que  $|\mu|$  y  $\Delta_k$  son del orden de  $\epsilon(k_F)$ , o de la energía evaluada en el inverso de la longitud de dispersión  $\epsilon(\alpha^{-1})$  en el límite  $k \gg k_F$ ,  $E_k = \epsilon_k$ ; y la ecuación para la brecha de energía, Ec. (5.71) en el límite de bajas energías no depende de  $k$  y es simplemente  $\Delta$ :

$$1 \simeq -\frac{U(0)}{V} \sum_k k \frac{1}{2\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}}. \quad (5.74)$$

Las ecuaciones que se tienen que resolver son Ecs. (5.73) y (5.74); para lo cual se considera el límite termodinámico, sustituyendo las sumas por integrales y considerando el límite donde  $k \rightarrow \infty$  tiene una divergencia, la cual se remueve mediante un proceso de renormalización. Además se considera la forma explícita del potencial de interacción y se utiliza un potencial típico que describe el proceso de colisión de dos partículas

$$U(0) \equiv \frac{4\pi\hbar^2}{m}\alpha.$$

Tomando en cuenta esas consideraciones se obtiene:

$$\sum_k \frac{1}{2} \left( \frac{1}{E_k} - \frac{1}{\epsilon_k} \right) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \alpha. \quad (5.75)$$

Definiendo las siguientes cantidades adimensionales

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\epsilon_F}, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{\epsilon_F}, \quad \tilde{\Delta} = \frac{\Delta}{\epsilon_F}. \quad (5.76)$$

las ecuaciones (5.73) y (5.75) son:

$$\frac{\pi}{k_F \alpha} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}^{1/2} \left[ \frac{1}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} - \frac{1}{\tilde{\epsilon}} \right], \quad (5.77)$$

$$\frac{4}{3} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}^{1/2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right]. \quad (5.78)$$

Las ecuaciones (5.77) y (5.78) determinan las variables  $\tilde{\mu}$  como función de  $\varsigma = 1/k_F \alpha$ ; además  $\alpha$  puede ser tanto positiva como negativa. Cuando  $\varsigma \rightarrow -\infty$ , se describe la región BCS de pares de fermiones correlacionados. Para que se cumpla este límite se necesita que  $\Delta \equiv 0$ ; en este caso la Ec. (5.78) se reduce a:

$$\frac{4}{3} = \int_0^{\tilde{\mu}} d\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}^{1/2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right] + \int_{\tilde{\mu}}^\infty d\tilde{\epsilon} \tilde{\epsilon}^{1/2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2}} \right] = \frac{4}{3} \tilde{\mu}^{3/2} \quad (5.79)$$

por lo tanto  $\tilde{\mu} \equiv 1$ , y consecuentemente  $\mu \simeq \epsilon_F$ . Mientras que la ecuación de la brecha es:

$$\Delta = \frac{8\epsilon_F}{e^2} e^{-\frac{\pi}{2k_F|\alpha|}}. \quad (5.80)$$

La ecuación anterior es la misma que se encontró en el límite de acoplamiento débil para la teoría BCS, Ec. (5.48), lo que indica que en el gas de fermiones hay una brecha en la energía de interacción. Para saber cómo es el estado  $n_k$  del sistema se consideran tres casos:

- (i) Si  $\epsilon_k \ll \epsilon_F \Rightarrow n_k \simeq 1$
- (ii) Si  $\epsilon_k \gg \epsilon_F \Rightarrow n_k \simeq 0$
- (iii) Si  $\epsilon_F - \frac{\Delta\hbar\omega}{2} < \epsilon_k < \epsilon_F + \frac{\Delta\hbar\omega}{2}$  se puede hacer una aproximación en serie de Taylor obteniendo los siguientes valores:
  - ⊗ Cuando  $\epsilon_k \simeq \epsilon_F - \frac{\Delta\hbar\omega}{2}$ ,  $n_k \simeq 1 - \frac{\Delta^2}{(\hbar\Delta\omega)^2}$
  - ⊗ Cuando  $\epsilon_k \simeq \epsilon_F + \frac{\Delta\hbar\omega}{2}$ ,  $n_k \simeq \frac{\Delta^2}{(\hbar\Delta\omega)^2}$

Para encontrar la expresión de la brecha de energía se consideran todos los valores de  $k$  que se encuentran en la banda de valores entre  $(\epsilon_k - \frac{\Delta\hbar\omega}{2}, \epsilon_k + \frac{\Delta\hbar\omega}{2})$  y se utiliza que  $U(0) = \frac{4\pi\hbar^2\alpha}{m}$  obteniendo así:

$$\Delta \equiv \Delta\omega e^{-\frac{\pi}{2k_F|\alpha|}}. \quad (5.81)$$

Comparando la ecuación anterior con la Ec. (5.48) se llega a

$$\frac{\hbar\Delta\omega}{2} = \left(\frac{2}{e}\right)^2 \epsilon_F. \quad (5.82)$$

La ecuación anterior indica que la temperatura de transición es la brecha de energía, y ésta da lugar al espectro de excitación. Este límite corresponde al estado BCS, donde se describe una colección de átomos fermiónicos los cuales tienen momento del centro de masa  $\vec{K} = 0$ , y están correlacionados.

Mientras que el límite  $\varsigma \rightarrow +\infty$ , corresponde a estados moleculares fuertemente ligados, que corresponde al régimen BEC. En la Ec. (5.77) para que se cumpla este límite los parámetros deben cumplir que

$$\tilde{\Delta} \equiv 0 \quad \text{y} \quad \tilde{\mu} < 0,$$

utilizando estas condiciones y definiendo  $y = \tilde{\epsilon}/|\tilde{\mu}|$  se tiene

$$|\tilde{\mu}|^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty dy y^{\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{y+1} - \frac{1}{y} \right) = -\pi\varsigma \quad \Rightarrow \quad -\pi|\tilde{\mu}|^{\frac{1}{2}} = \pi\varsigma \quad (5.83)$$

$$\therefore \quad \mu = -\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}, \quad (5.84)$$

que es la mitad de la energía de ligadura de un estado ligado de dos partículas dada una longitud de dispersión  $\alpha$ . La ecuación de la brecha es:

$$\epsilon_k F_k + \frac{1}{2V} \sum_{k'} U(k-k') F_{k'} \simeq \mu F_k, \quad (5.85)$$

la cual representa una ecuación de Schrödinger, que se observa al sustituir  $F_k = C_k$  y utilizar la transformada inversa de Fourier:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + \frac{1}{2} U(r) \psi(r) = \mu \psi(r). \quad (5.86)$$

Como  $\mu < 0$  nos queda la siguiente ecuación de Schrödinger para la coordenada relativa

$$-\frac{\hbar^2}{2(m/2)} \nabla^2 \psi(r) + U(r) \psi(r) = \epsilon_B \psi(r); \quad \epsilon_B \psi(r) = -2|\mu| = \frac{\hbar^2}{m\alpha^2} < 0. \quad (5.87)$$

Como  $\epsilon_B$  es la energía de ligadura de una molécula, en este límite se tienen moléculas diatómicas.

En esta sección se describió un sistema de  $N$  fermiones interactuando, los cuales no están confinados y a partir de considerar una función de onda de pares se describe el sistema tanto en el límite BCS como en el BEC. A continuación se hará una breve descripción de las características del condensado molecular.

### Condensado molecular.

Desde la primera realización del condensado de Bose Einstein en 1995 [1], se han realizado una variedad de experimentos que se enfocan en las características del condensado, desde la coherencia de láseres atómicos hasta el comportamiento como superfluido. Por ejemplo, en el experimento de la referencia [150], donde se utilizó rubidio, se detectaron oscilaciones coherentes entre pares de átomos y de moléculas formadas a partir de un BEC atómico, lo cual muestra que dichas moléculas tienen propiedades de coherencia las cuales se esperan en el caso del condensado molecular.

Experimentalmente, hay varias formas de crear un condensado molecular, una de las primeras técnicas se basó en aquellas utilizadas para producir un BEC atómico, donde se pre-enfrían las moléculas, para posteriormente colocarlas en una trampa magnética y enfriar nuevamente el gas, hasta que la temperatura de éste sea menor que la temperatura crítica de la transición de fase al condensado de Bose-Einstein. El inconveniente de esta técnica radica en que las técnicas de enfriamiento láser que se desarrollaron para enfriar átomos no enfrían lo suficiente a las moléculas, por lo que para estas últimas se han desarrollado técnicas criogénicas. Otra opción es emplear las resonancias de Feshbach, y mediante un campo magnético externo entonar la energía de los dos átomos de tal suerte que formen un estado molecular, teniendo así una fracción de átomos que se convirtieron en moléculas [12–14, 21].

El condensado molecular surge en la región donde  $k_F\alpha \rightarrow 0^+$  que corresponde a la descripción de un gas molecular que interactúa débilmente, es decir, se refiere al condensado de Bose-Einstein de moléculas diatómicas, conocidas como dímeros. Si el radio de dímero es del orden de la longitud de dispersión y mucho más pequeño que la separación entre moléculas ( $1/k_F$ ), estos dímeros pueden condensarse, siendo la energía de ligadura

$$\epsilon_{0b} = \frac{\hbar^2}{m\alpha^2}.$$

Para describir el estado cuando todas las moléculas se encuentran en un condensado de Bose-Einstein se utiliza la ecuación de Gross-Pitaevskii. Cada molécula siente el potencial de campo medio debido a todas las demás moléculas en el condensado:

$$V_H(r, t) = \int dr' v(r - r') n_c(r', t) \quad (5.88)$$

$n_c(\vec{r}, t)$  es la densidad local del condensado.

El condensado de moléculas se describe por medio de la función  $\Phi(r, t)$ , la cual satisface la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{tr} + V_H(r, t) \right] \Phi, \quad (5.89)$$

donde  $V_{tr}$  es el potencial de confinamiento y  $V_H$  el potencial de interacción entre las moléculas, que en el caso de que la interacción sea en el canal de onda- $s$  tienen la siguiente forma:

$$V_H(r, t) = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_d}{M} n_c(r, t) \quad (5.90)$$

donde  $M = 2m$  y  $\alpha_d = 0.6\alpha$  [42], es la longitud de dispersión para las moléculas, la cual se escala con la longitud de dispersión de los átomos. Cabe mencionar que la longitud de dispersión del dímero  $\alpha_d$ , surge debido a los efectos de la interacción entre las moléculas, pues los dímeros pueden presentar colisiones entre sí. Esa longitud  $\alpha_d$  aparece cuando los dímeros están débilmente ligados, es decir, cuando  $\alpha_d$  es mayor que el alcance del potencial de interacción.

### 5.1.3 Otros métodos para la descripción de los gases atómicos ultrafríos.

Existen varios métodos para poder resolver un problema de muchos cuerpos, entre los cuales se encuentran: la aproximación de Thomas-Fermi, teoría de las funcionales de la densidad, método de Hartree-Fock, funciones de Green tanto en espacio real como complejo, teoría de perturbaciones de muchos cuerpos y métodos variacionales utilizando simulaciones Monte-Carlo, por mencionar algunos. Nosotros utilizaremos este último para resolver el sistema de un gas de fermiones confinado e interactuante, pero cabe mencionar que mucha gente resuelve el sistema utilizando cualquiera de los métodos mencionados anteriormente, pero además asumen la aproximación de la densidad local (LDA) [151], la cual se describirá a continuación.

La aproximación de la densidad local consiste en que el sistema a estudiar tiene, en una región pequeña del espacio alrededor del punto  $\vec{r}$ , las mismas propiedades que un gas homogéneo con densidad local uniforme  $n(\vec{r})$  y temperatura  $T$  [53, 58, 152]. En el contexto del problema de interés, a primera aproximación no se consideran los efectos de atrapamiento, de tal forma que la densidad de energía se puede expresar como  $\bar{\varepsilon}(n) = nE(n)/N$ , donde  $E(n)/N$  es la energía por átomo del gas homogéneo [46], y el potencial químico  $\mu$  se considera como

$$\mu_{LDA}(\vec{r}) = \mu - V_{oa}(\vec{r}), \quad (5.91)$$

donde  $\mu_{LDA}$  es el potencial químico local determinado por la ecuación de estado del sistema homogéneo,  $\mu$  es el potencial químico del gas atrapado,  $V_{oa}(\vec{r}) = m\omega^2 r^2/2$  es el potencial armónico,  $\vec{r}$  es la posición de los átomos dentro de la trampa,  $m$  su masa y  $\omega$  la frecuencia característica de la trampa. La ecuación anterior expresa el hecho que el potencial químico es uniforme en un gas en equilibrio térmico.

En esta aproximación la densidad de energía  $\bar{\varepsilon}(n)$ , se expresa en términos de la energía por partícula para el sistema homogéneo  $E(n)/N$ , por lo que para obtener la energía del gas atrapado  $E$  se utiliza la siguiente forma integral:

$$E = \int d\vec{r} [\bar{\varepsilon}(n(\vec{r})) + V_{oa}(\vec{r})n(\vec{r})], \quad (5.92)$$

la cual consiste de la suma de la energía interna conocida también como energía liberada (release energy)

$$E_{rel} = \int d\vec{r} \bar{\varepsilon}(n(\vec{r})),$$

y de la energía de la trampa armónica

$$E_{oa} = \int V_{oa}(\vec{r})n(\vec{r}).$$

En el caso en el cual el sistema de estudio sea una mezcla balanceada de fermiones, en la ecuaciones anteriores se debe considerar que  $N = N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$ ; por lo que la densidad total del gas o perfil de densidad es  $n(\vec{r}) = n_{\uparrow}(\vec{r}) + n_{\downarrow}(\vec{r})$ , y cuyo valor en equilibrio se determina mediante la relación variacional

$$\frac{\partial(E - \mu N)}{\partial n(\vec{r})} = 0,$$

que da lugar a la ecuación (5.91), la cual escrita explícitamente en términos de  $n(\vec{r})$  es:

$$\mu_{LDA}(n(\vec{r})) = \mu - V_{oa}(\vec{r}), \quad (5.93)$$

donde  $\mu_{LDA}(n(\vec{r})) = \partial\bar{\varepsilon}/\partial n$ , y  $\mu$  se fija por medio de la condición de normalización  $\int d\vec{r}n(\vec{r}) = N$ . La Ec. (5.93) proporciona además una ecuación implícita para  $n(\vec{r})$  [46].

La aproximación de la densidad local es válida cuando  $\mu \gg \hbar\omega$ . En los gases de Bose esta condición se garantiza debido a la interacción repulsiva entre los átomos, mientras que en el caso de un gas de Fermi, incluso en el caso no interactuante, la Ec. (5.93) se cumple si se considera que el potencial químico local tiene la forma

$$\mu_{LDA}(n) = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3}.$$

Por último, cabe mencionar que las interacciones modifican la forma y tamaño del perfil de densidad  $n(\vec{r})$ , y los efectos de estas se toman en cuenta por medio de la Ec. (5.93) una vez que se conoce el potencial químico local.

## 5.2 Modelo de sistema de un gas de Fermi de dos componentes.

El sistema que se analizará en la presente tesis, está constituido por  $2N$  fermiones de masa  $m$ , que se encuentran en dos diferentes estados hiperfinos igualmente poblados, los cuales se distinguirán por medio de los subíndices  $\uparrow$  y  $\downarrow$ ,  $N = N_\uparrow = N_\downarrow$ . Este gas de fermiones está confinado por medio de una trampa armónica isotrópica tridimensional de frecuencia  $\omega$ . Los átomos interactúan mediante colisiones entre partículas en diferentes estados de espín, la dispersión es en el canal de onda- $s$ . El potencial de interacción es un potencial de corto alcance atractivo

$$V = -V_0 e^{-2r_{ij}/b},$$

donde  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  denota la distancia entre la partícula  $i$  y la  $j$ ; el alcance de la interacción es  $r_v = b/2$ ; este potencial es el mismo que se utilizó en la descripción del sistema de dos cuerpos, la forma de este potencial se muestra en la Figura 4.2. El hecho que  $V_0 > 0$ , implica que este potencial no es repulsivo en el origen.

Consideramos que el gas de Fermi se encuentra a temperatura cero y que el proceso de colisión de los dos cuerpos se aproxima por la descripción de un solo canal. El hamiltoniano para este sistema de muchos cuerpos es:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i,j=1}^N \left[ \frac{p_{i\uparrow}^2 + p_{j\downarrow}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (r_{i\uparrow}^2 + r_{j\downarrow}^2) \right] + \sum_{i,j=1}^N V(|\vec{r}_{i\uparrow} - \vec{r}_{j\downarrow}|) \\ &= \sum_{i,j=1}^N \left[ \frac{p_{i\uparrow}^2 + p_{j\downarrow}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (r_{i\uparrow}^2 + r_{j\downarrow}^2) \right] - \sum_{i,j=1}^N V_0 e^{-2r_{ij}/b}. \end{aligned} \quad (5.94)$$

En el hamiltoniano anterior se consideró la energía cinética de cada partícula, así como el potencial de confinamiento que se aproxima por un potencial armónico y el potencial de interacción para cada par de partículas.

Para poder encontrar las eigenenergías y las eigenfunciones del hamiltoniano descrito en la ecuación anterior se considerarán sólo configuraciones de los átomos que formen capas cerradas dentro de la trampa. Los niveles de energía en la trampa se llenan considerando todas las posibles configuraciones de los números cuánticos  $n_i$ ,  $i = x, y, z$ , al máximo nivel de ocupación se le conoce como capa cerrada  $\mathcal{M}_F$ ,  $\mathcal{M}_F \leq n_x + n_y + n_z$ . El estado base del sistema se construye considerando todos los estados de una sola partícula con energías que aumentan desde  $E_0 = 3\hbar\omega/2$  hasta la energía de Fermi  $E_F = (\mathcal{M}_F + 3/2)\hbar\omega$ . El radio de Fermi  $R_F$  y el número de onda  $k_F$  son definidos a través de la energía de Fermi como  $R_F^2 = 2E_F/m\omega^2$  y  $E_F = (\hbar k_F)^2/2m$ , respectivamente. Para un gran número  $N$  de partículas, la energía de Fermi es  $E_F \sim (6N)^{1/3}\hbar\omega$ .

Para poder obtener el valor del número de partículas  $N$  correspondiente a una capa dada se hace la siguiente suma [50]:

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} 1 = \frac{(\mathcal{M}_{\mathcal{F}} + 1)^3 + 3(\mathcal{M}_{\mathcal{F}} + 1)^2 + 2(\mathcal{M}_{\mathcal{F}} + 1)}{6}. \quad (5.95)$$

En la Tabla 5.1, se muestra el número de partículas para ciertos valores de la capa cerrada  $\mathcal{M}_{\mathcal{F}}$ , así como también se muestra la correspondiente energía del gas de Fermi ideal atrapado  $E_{IFG}$ , la cual se calcula utilizando la siguiente ecuación [50]:

$$\frac{E_{IFG}}{2N} = \frac{3}{4} [\mathcal{M}_{\mathcal{F}} + 2] \hbar\omega. \quad (5.96)$$

$\mathcal{M}_{\mathcal{F}}$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$N$	1	4	10	20	35	56	84	120	165
$E_{IFG}$	1.5	2.25	3	3.75	4.5	5.25	6	6.75	7.5

**Tabla 5.1:** Valores del número de partículas  $N$  para algunas capas  $\mathcal{M}_{\mathcal{F}}$

### 5.3 Método Monte-Carlo variacional.

El método variacional se utiliza frecuentemente para encontrar la energía y eigenfunciones del estado base del sistema a estudiar para una forma dada del potencial de interacción; y genera una cota superior al valor de la energía del estado base de ese sistema [153]. Se propone una función de onda prueba  $\Psi_{\lambda}$  que depende de un conjunto de parámetros variacionales  $\lambda_i$ , el valor de expectación de la energía es, en este caso

$$E(\lambda_i) = \frac{\langle \Psi_{\lambda_i} | H | \Psi_{\lambda_i} \rangle}{\langle \Psi_{\lambda_i} | \Psi_{\lambda_i} \rangle}. \quad (5.97)$$

El valor óptimo del parámetro variacional se obtiene al minimizar el valor de expectación de la energía con respecto a los parámetros variacionales, es decir, se calcula

$$\frac{\partial E(\lambda_i)}{\partial \lambda_i} = 0, \quad (5.98)$$

En el caso de un sistema de  $2N$ -átomos, para poder calcular el valor esperado de la energía se necesita evaluar  $6N$  integrales. Cabe mencionar que debido a la cantidad de integrales a resolver se utilizan métodos numéricos como el método cuántico Monte Carlo, el cual incluye correlaciones entre las partículas y es un método que evalúa de forma eficiente las integrales de muchas dimensiones.

La principal idea del método Monte Carlo [154] es evaluar la integral en una muestra representativa y pequeña del sistema, donde la secuencia de las configuraciones están distribuidas respecto a  $|\Psi_\lambda|^2/\langle\Psi_\lambda|\Psi_\lambda\rangle$  sin tener que evaluar la integral en cada uno de los puntos que se están integrando. Aunque el método Monte Carlo es una herramienta sumamente útil y eficaz para evaluar integrales multidimensionales, para poder explicar la idea básica del método se utilizará un modelo en una dimensión. La integral que se quiere evaluar es

$$I = \int_0^1 f(x)dx, \quad (5.99)$$

donde  $f$  denota cualquier función. Hay varias formas para calcular la integral, sin embargo una forma diferente es pensar que  $I$  es el promedio de la función  $f$  en el intervalo  $[0, 1]$ , por lo que esta integral es

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i). \quad (5.100)$$

En la ecuación anterior el promedio de  $f$  se evalúa considerando su valor en  $N$  puntos  $x_i$ , con  $x_i$  la variable independiente, que son escogidos al azar y con igual probabilidad dentro del intervalo  $[0, 1]$ . También se calcula la incertidumbre asociada a esta integral o fórmula de cuadratura<sup>5</sup>. Se considera  $f_i = f(x_i)$  como una variable aleatoria y se utiliza el teorema del límite central para  $N$  grandes, obteniendo:

$$\sigma_I^2 \approx \frac{1}{N} \sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right], \quad (5.101)$$

donde  $\sigma_f$  es la varianza en  $f$ , es decir, es una medida de cuanto  $f$  se desvía de su promedio dentro de la región de integración.

La ecuación (5.101) muestra dos aspectos importante del método Monte Carlo:

- i) La incertidumbre al calcular la integral,  $\sigma_I$  decrece como  $N^{-1/2}$ , por lo que al utilizar un mayor número de puntos se obtendrá un resultado mejor.
- ii) La precisión es mayor si  $\sigma_f$  es más pequeña.

Hasta el momento se ha hecho una descripción en general de los métodos Monte Carlo, sin embargo dentro de éstos cabe destacar tres:

- Método variacional Monte Carlo (VMC): Es utilizado para optimizar el valor de espectación de las observables mediante una función de prueba.
- Método de difusión Monte Carlo (DMC): Se basa en la semejanza que hay entre las ecuaciones de difusión y la ecuación de Schrödinger, cuando esta última está escrita

---

<sup>5</sup>En inglés, quadrature

en tiempo imaginario. Las propiedades del sistema cuántico de muchos cuerpos son estudiados debido al parecido que tiene con los procesos de difusión clásicos de las partículas del sistema.

- Método Monte Carlo de integrales de trayectoria (PIMC): Se basa en la idea de mapear la mecánica cuántica en la mecánica clásica propuesta por Dirac.

Los métodos VMC y DMC, son desarrollados principalmente para estudiar las propiedades del estado base a temperatura cero, mientras que el PIMC es apropiado para estudiar propiedades a temperatura finita.

Uno de los algoritmos utilizados para el método variacional Monte Carlo es el Algoritmo Metrópolis desarrollado por N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth y A. H. Teller en la referencia [155]; dicho algoritmo provee un método para producir variables aleatorias dada una distribución de probabilidad. En el algoritmo de Metropolis se generan un conjunto de configuraciones  $\{\vec{R}_i\}$  en el espacio de posiciones. El valor de expectación de la energía  $E_T$  se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$E_T \simeq \frac{1}{N_p} \sum_i^{N_p} E_L(\vec{R}_i), \quad (5.102)$$

se hace un promedio sobre las energías obtenidas en cada configuración. El resultado es exacto en el límite donde  $N_p \rightarrow \infty$ ; donde  $N_p$  es el número de configuraciones y  $E_L(\vec{R}_i)$  es la energía local.

El espacio de configuraciones es explorado utilizando la muestra elegida mediante un criterio de importancia que describimos a continuación. Se escoge un punto inicial  $\vec{R}$ , y se calcula  $\Psi(\vec{R})$ ; posteriormente se genera una nueva configuración  $\vec{R}'$  sumando un vector aleatorio  $\vec{D}$  a  $\vec{R}$ ;  $\vec{R}' = \vec{R} + \vec{D}$ . Para que esta nueva configuración sea aceptada se debe cumplir que  $|\Psi(\vec{R}')|^2 > |\Psi(\vec{R})|^2$ , si no cumple esta condición, se compara la razón  $|\Psi(\vec{R}')|^2/|\Psi(\vec{R})|^2$  con un número aleatorio entre  $[0, 1]$ ; si la razón es más grande que el número aleatorio, la configuración se acepta, si no se rechaza. De esta manera se proporcionan suficientes puntos a la muestra, y el promedio de la energía local converge con una desviación estandar que disminuye como  $\sigma^2 \sim \frac{1}{N_{mc}}$ . Donde  $N_{mc}$  es el número de mediciones no correlacionadas.

La confiabilidad del método VMC depende crucialmente de la elección de la función de onda de prueba, que debe cumplir las siguientes condiciones:

- \* Considerar la propiedad de simetría asociada al tipo de partículas del sistema, es decir, debe ser antisimétrica para el caso de los fermiones y simétrica para los bosones.
- \* Debe de satisfacer las condiciones generales esperadas para la función de onda exacta, como lo son las condiciones de frontera.

- \* La función de onda  $\Psi(\vec{R})$  y  $\nabla\Psi(\vec{R})$  deben ser continuas cuando el potencial es finito.
- \* Deben existir las siguientes integrales  $\int \Psi^*\Psi dR$ ,  $\int \Psi^*H\Psi dR$  y  $\int \Psi^*H^2\Psi dR$ .

Una ventaja del método VMC, es que en este método se pueden incluir las correlaciones entre las diferentes partículas del sistema. Para incluir las correlaciones se utilizan las funciones de Jastrow, cuya forma depende del problema en cuestión. En las siguientes secciones se describirán las funciones de onda prueba que se utilizan dependiendo de la región a estudiar, es decir si se considera la región BCS, BEC o el cruce.

### 5.3.1 Funciones de onda prueba tipo Jastrow-Slater.

Como se mencionó en la primera sección de este capítulo los átomos de Fermi pueden estar en un estado formado por pares de Cooper o como estados moleculares, dependiendo de la interacción caracterizada por la longitud de dispersión. En esta sección se analizará las funciones que se utilizarán para describir la región BCS, en la cual hay correlaciones de largo alcance entre pares de partículas.

Consideremos el caso en el que dado un alcance del potencial  $r_v = b/2$ , la amplitud del potencial de interacción es pequeña de tal forma que en el caso de un gas homogéneo no están permitidos los estados ligados. En este caso, el sistema se puede describir de forma aproximada por el gas ideal de Fermi, por lo que una propuesta para la función de onda en este regimen es una función de Jastrow-Slater  $\Psi_{\omega',\lambda_J}^{JS}$  de la forma

$$\Psi_{\omega',\lambda_J}^{JS} = \Phi_{IFG}^{\omega'} \cdot F_{\lambda_J}^J. \quad (5.103)$$

$\lambda_J$  y  $\omega'$  son los parámetros variacionales,  $\Phi_{IFG}$  es la función de onda del gas ideal de Fermi, la cual está formada por el producto de determinantes de Slater que describen el sistema de fermiones atrapados por medio de una trampa armónica y que no interactúan entre sí, escalados con una frecuencia,  $\omega'$ , en general diferente a la frecuencia natural de la trampa,  $\omega$ . Se escribe un determinante de Slater por cada estado hiperfino, siendo la expresión explícita de la función  $\Phi_{IFG}^{\omega'}$ .

$$\Phi_{IFG}^{\omega'} = \mathcal{A}_{\uparrow} \prod_{i=1,N} \phi_{\vec{n}_{\uparrow i}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\uparrow i} \right) \mathcal{A}_{\downarrow} \prod_{i=1,N} \phi_{\vec{n}_{\downarrow i}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\downarrow i} \right). \quad (5.104)$$

La función  $F_{\lambda}^J$  de la Ec. (5.103), es la función de Jastrow que incluye explícitamente los efectos del potencial de interacción. Al construir la función de onda de esta manera, se asegura que ésta es totalmente antisimétrica ante el intercambio de partículas idénticas.

Los determinantes de Slater de la Ec. (5.104), están formados por eigenestados de una sola partícula en la posición  $\vec{r}$ ,  $\phi_{\vec{n}}^{ho}(\vec{r})$ , que son solución de la ecuación de Schrödinger no interactuante confinada en una trampa armónica, cuyos números cuánticos son  $\vec{n}$ . La

energía de cada estado de una sola partícula está caracterizado por tres números cuánticos enteros  $\vec{n} \equiv (n_x, n_y, n_z)$ :

$$E_{\mathbf{n}} = \hbar\omega \left( \frac{3}{2} + n_x + n_y + n_z \right), \quad (n_i = 0, 1, 2, \dots). \quad (5.105)$$

Como  $n = n_x + n_y + n_z$ , la degeneración de cada nivel de energía es  $(n+1)(n+2)/2$ . La función de onda  $\phi_{\mathbf{n}}^{ho}(\vec{r})$  tiene la forma:

$$\phi_{n_x, n_y, n_z}^{ho}(\vec{r}) = \left( \frac{1}{r_{ho}^2 \pi} \right)^{3/4} \prod_{\xi=x,y,z} \frac{H_{n_\xi}(\xi/r_{ho})}{\sqrt{2^{n_\xi} n_\xi!}} e^{-\xi^2/2r_{ho}^2}, \quad (5.106)$$

donde  $H_{n_\xi}(\xi/a_{ho})$  son las funciones de Hermite de orden  $n_\xi$  y  $r_{ho} = \sqrt{\hbar/m\omega}$  es la unidad natural de longitud del oscilador armónico.

En la literatura sobre gases de Fermi interactuantes, la función de onda de Jastrow usualmente se escribe como un producto,  $\prod_{i,j} f_{ij}$ , de funciones  $f$  que dependen de los grados de libertad de las partículas interactuantes  $i, j$ . Por ejemplo, en las referencias [51, 67–69],  $f$  es una función que depende de la distancia entre las partículas  $\vec{r}$  y que es solución del problema de dos partículas interactuantes, en el espacio libre. El potencial de interacción influye en las partículas hasta una cierta distancia  $d$  conocida como distancia de saneamiento o de curación<sup>6</sup> después de la cual la función  $f$  es una constante. En dichos trabajos, el parámetro  $d$  se escoge de tal forma que minimiza la energía.

La forma en que nosotros trabajamos es diferente, pues consideraremos funciones de onda de muchos cuerpos las cuales tienen la característica que son funciones  $F_\lambda^J$  continuas con derivadas continuas. El valor óptimo del parámetro variacional  $\lambda_J$  de la función de onda prueba del sistema de muchos cuerpos, Ec. (5.103), establecerá una distancia efectiva  $d$ . En el caso del sistema de estudio descrito en esta tesis se utilizaron dos opciones para la función de Jastrow, las cuales son:

$$(i) F_{\lambda_{J1}}^J = \prod_{i,j} f_{ij} = \exp[-\lambda_{J1} \sum_{i_\uparrow, j_\downarrow} V(|\vec{r}_{i_\uparrow} - \vec{r}_{j_\downarrow}|)], \text{ donde,}$$

$$f_{ij} = \exp(-\lambda_{J1} V_0 e^{-2r_{i,j}/b}) \quad (5.107)$$

$$(ii) F_{\lambda_{J2}}^J = \prod_{i,j} f_{ij}, \text{ donde}$$

$$f_{ij} = J_0(z_0 e^{-r_{i,j}/\lambda_{J2}})(1 + c e^{-2r_{i,j}/\lambda_{J2}})P(r_{i,j}/\lambda_{J2})/r_{i,j}. \quad (5.108)$$

La primer opción de la función de onda variacional, Ec. (5.107), tiene la ventaja de volverse exacta cuando no hay interacciones entre estados hiperfinos ( $\lambda_{J1} = 0$ ), es decir, en el límite del gas de Fermi ideal atrapado, donde las únicas correlaciones que existen son aquellas impuestas por el principio de exclusión de Pauli. Esta función de onda está basada

<sup>6</sup>En inglés, healing distance.

en los cálculos que se han realizado en el estudio de la materia nuclear [156–158], donde una elección adecuada del potencial de interacción permite explorar de forma dinámica la interacción de la materia del régimen nuclear a quark. Además, esta forma de la función de onda permite en la simulación Monte Carlo, estimar el valor esperado de la energía calculando sólo funciones de onda que dependen de las coordenadas espaciales, sin necesidad de calcular las derivadas espaciales de las funciones de onda [159].

La segunda opción está inspirada en la estructura general de las funciones de onda de dos partículas confinadas por una trampa armónica y que interactúan por medio del potencial exponencial de corto alcance, que corresponde a la Ec. (4.28), la cual se describió en la sección 4.3.2. Esta función de onda tiene la virtud que nos permite explorar alcances del potencial más cortos que aquellos permitidos por la Ec. (5.107). Además reproduce el hecho que incluso la menor interacción conduce a correlaciones de dos cuerpos de largo alcance, las cuales están de forma implícita en el polinomio  $P(r_{i,j}/b)$ . Las desviaciones de  $\lambda_{J2}$  respecto al alcance se deben considerar como efectos de muchos cuerpos.

La estructura de la función de onda variacional para la región BCS, permite simplificar el valor esperado del operador de la energía cinética a través de una integración por partes [156, 157] de tal forma que se tiene:

$$\frac{\langle \Psi_{\lambda_J} | H_1 | \Psi_{\lambda_J} \rangle}{\langle \Psi_{\lambda_J} | \Psi_{\lambda_J} \rangle} = E_{IFG} + 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j,j'=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\langle \Psi_{\lambda_J} | \vec{\nabla}_i(\log f_{ij}) \cdot \vec{\nabla}_i(\log f_{ij'}) | \Psi_{\lambda_J} \rangle}{\langle \Psi_{\lambda_J} | \Psi_{\lambda_J} \rangle}, \quad (5.109)$$

donde:

$$H_1 = \sum_{i,j=1}^N \left[ \frac{p_{i\uparrow}^2 + p_{j\downarrow}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (r_{i\uparrow}^2 + r_{j\downarrow}^2) \right], \quad (5.110)$$

y  $E_{IFG}$  es la energía de los  $2N$  fermiones atrapados pero no interactuantes definida en la Ec. (5.96). El segundo término de la Ec. (5.109) refleja el incremento de la energía cinética del sistema con respecto a la energía calculada para el gas de Fermi ideal debido a la interacción entre partículas.

Cuando se utiliza la Ec. (5.107) como opción para la función de Jastrow, al hacer los cálculos del valor esperado del hamiltoniano definido en la Ec. (5.94), es conveniente definir dos factores  $\mathcal{W}_{\lambda_{J1}}$  y  $\mathcal{V}_{\lambda_{J1}}$  de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N \sum_{j,j'=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \langle \Psi_{\lambda_{J1}} | \vec{\nabla}_i(\log f_{ij}) \cdot \vec{\nabla}_i(\log f_{ij'}) | \Psi_{\lambda_{J1}} \rangle \\ &= \frac{\lambda_{J1}^2 \hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \langle \Psi_{\lambda_{J1}} | \sum_{j,j'=1}^N \vec{\nabla}_i V(r_{i,j}) \cdot \vec{\nabla}_i V(r_{i,j'}) | \Psi_{\lambda_{J1}} \rangle \\ &\equiv \lambda_{J1}^2 \mathcal{W}_{\lambda_{J1}} \langle \Psi_{\lambda_{J1}} | \Psi_{\lambda_{J1}} \rangle, \end{aligned} \quad (5.111)$$

y

$$\sum_{ij} \langle \Psi_{\lambda_{J1}} | V(r_{i,j}) | \Psi_{\lambda_{J1}} \rangle \equiv \mathcal{V}_{\lambda_{J1}} \langle \Psi_{\lambda_{J1}} | \Psi_{\lambda_{J1}} \rangle, \quad (5.112)$$

por lo que el valor esperado de la energía total es:

$$E(\lambda_{J1}) = E_{IFG} + 2\lambda_{J1}^2 \mathcal{W}_{\lambda_{J1}} + \mathcal{V}_{\lambda_{J1}}. \quad (5.113)$$

Las funciones que deben evaluarse son entonces ( $\mathcal{W}_{\lambda_{J1}}$  y  $\mathcal{V}_{\lambda_{J1}}$ ), las cuales son locales; y los valores esperados de estas funciones se calculan utilizando el método Monte-Carlo. Al utilizar la función de onda descrita por la Ec. 5.108 se obtiene también la Ec. 5.113.

La función de onda descrita por la Ec. (5.103), ya sea utilizando como función de Jastrow la dada por la Ec. (5.107) o la Ec. (5.108), describe adecuadamente el regimen BCS, cuando  $\alpha \rightarrow 0_-$ ; conforme la longitud de dispersión se acerca a la región del cruce  $\alpha \rightarrow \infty$ , se espera que esa función no describa apropiadamente la interacción, pues los efectos debido a los pares son fundamentales en la región de interacción fuerte, por lo que los números cuánticos de los determinantes de Slater,  $\Phi_{IFG}$ , no representan de forma adecuada la situación física del sistema en esa región.

Para el análisis de la región BCS débilmente interactuante, donde  $1/k_F\alpha \rightarrow -\infty$  otra propuesta para la función de onda que describe esta región y con la cual se calcularán las energías para diferentes alcances del potencial, es aquella donde el parámetro  $\lambda_J = 0$ , teniendo así sólo como parámetro variacional la frecuencia  $\omega'$ . La función de onda propuesta en este caso es

$$\Phi_{IFG}^{\omega'} = \mathcal{A}_{\uparrow} \prod_{i=1,N} \phi_{\vec{n}_{\uparrow i}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\uparrow i} \right) \mathcal{A}_{\downarrow} \prod_{i=1,N} \phi_{\vec{n}_{\downarrow i}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\downarrow i} \right). \quad (5.114)$$

Para obtener el valor de la energía se calcula  $\langle \Phi_{IFG}^{\omega'} | H | \Phi_{IFG}^{\omega'} \rangle$ , donde  $H$  es el hamiltoniano de la Ec. (5.94). Escribiendo de forma explícita este valor medio:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{IFG}^{\omega'} | H | \Phi_{IFG}^{\omega'} \rangle &= \langle \Phi_{IFG}^{\omega'} | \sum_{i,j=1}^N \left[ \frac{p_{i\uparrow}^2 + p_{j\downarrow}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (r_{i\uparrow}^2 + r_{j\downarrow}^2) \right] | \Phi_{IFG}^{\omega'} \rangle \\ &- \langle \Phi_{IFG}^{\omega'} | \sum_{i,j=1}^N V_0 e^{-2r_{ij}/b} | \Phi_{IFG}^{\omega'} \rangle. \end{aligned} \quad (5.115)$$

Si en primera instancia se consideran sólo los términos correspondientes a una partícula, la función de onda sería

$$\tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} = \phi_{\vec{n}_{\uparrow}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\uparrow} \right) \phi_{\vec{n}_{\downarrow}}^{ho} \left( \sqrt{\frac{m\omega'}{\hbar}} \vec{r}_{\downarrow} \right). \quad (5.116)$$

Se calcula  $\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle$ , donde  $\tilde{H}$  es el hamiltoniano de una partícula; este término se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle &= \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \left[ \frac{p_{i\uparrow}^2 + p_{j\downarrow}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (r_{i\uparrow}^2 + r_{j\downarrow}^2) \right] | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle \\ &- \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | V_0 e^{-2r_{ij}/b} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle \\ &= \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H}_1 | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle + \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H}_2 | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle. \end{aligned} \quad (5.117)$$

En la ecuación anterior, el valor medio de  $\tilde{H}$  se escribe en términos de dos valores medios dados por los hamiltonianos  $\tilde{H}_1$  y  $\tilde{H}_2$ .  $\tilde{H}_1$  corresponde al valor medio del hamiltoniano del oscilador armónico utilizando una función de onda escalada, mientras que  $\tilde{H}_2$  corresponde al hamiltoniano que solo contiene el término del potencial de interacción. El valor medio por partícula para  $\tilde{H}_1$  es:

$$\frac{\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H}_1 | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle}{2N} = \frac{\epsilon_{trampa} + \tilde{\epsilon}_0}{2} \left( \frac{\omega'}{\omega} + \frac{\omega}{\omega'} \right), \quad (5.118)$$

donde  $\tilde{\epsilon}_0 = 3/2\hbar\omega$  y  $\epsilon_{trampa} = 0.75\mathcal{M}_F\hbar\omega$ . Mientras que para poder obtener el valor medio de  $\tilde{H}_2$  es necesario calcular:

$$\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | \tilde{H}_2 | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle = \langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} | V_0 e^{-r/r_v} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega'} \rangle.$$

Observamos que el alcance del potencial  $r_v$  también se escala por un factor proporcional a la frecuencia  $\omega'$ , si denotamos  $\xi = \frac{m\omega'}{\hbar}r$  al argumento de las funciones del determinante de Slater, entonces el alcance del potencial escalado escrito de forma adimensional es:

$$\tilde{r}_v = r_v \frac{m\omega}{\hbar} \sqrt{\frac{\omega'}{\omega}},$$

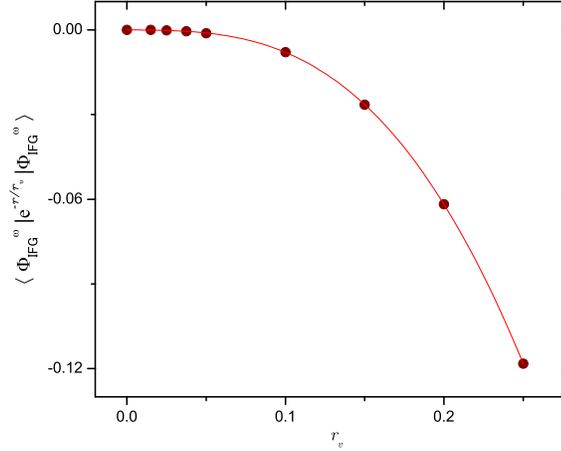
siendo así que el potencial de interacción es

$$V_0 e^{-\frac{\xi}{\tilde{r}_v}}.$$

El valor medio del potencial de interacción escalado, sin considerar la amplitud del potencial  $V_0$ , es decir,  $\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} | e^{-\frac{\xi}{\tilde{r}_v}} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} \rangle$ , se calcula por medio de simulación Monte Carlo, para diferentes valores del alcance del potencial  $r_v$ . Una vez obtenidos estos valores se ajusta un polinomio de cuarto orden cuyo argumento es el alcance del potencial:

$$\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} | e^{-\frac{\xi}{\tilde{r}_v}} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} \rangle = C_1 r_v + C_2 r_v^2 + C_3 r_v^3 + C_4 r_v^4 \quad (5.119)$$

En la Figura 5.4 se muestra los valores obtenidos para  $\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} | e^{-\frac{\xi}{\tilde{r}_v}} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\tilde{\omega}} \rangle$  como función del alcance del potencial. Para estos datos se utilizaron los siguientes valores  $r_v = 0.25, 0.2, 0.15, 0.1, 0.05, 0.0375, 0.025, 0.015$ . En este caso los valores de los coeficientes son:  $C_1 = -0.00723, C_2 = 0.15371, C_3 = -9.2769$  y  $C_4 = 4.82904$ . Esta aproximación es buena



**Figura 5.4:** Valor medio del potencial de interacción  $\langle \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega} | e^{-\rho/\tilde{r}_v} | \tilde{\Phi}_{IFG}^{\omega} \rangle$  como función del alcance del potencial. Los puntos corresponden a los datos calculados, la línea sólida es el ajuste con un polinomio de cuarto orden.

pues si se incluyen los coeficientes  $C_5$  y  $C_6$  estos son muy pequeños del orden de  $\sim 10^{-4}$  y  $10^{-5}$  respectivamente.

Para poder obtener la expresión completa del valor medio de  $\tilde{H}_2$  basta conocer la amplitud del potencial  $V_0$ , para lo cual se tienen dos opciones:

- (i) En el capítulo cuatro, la amplitud de la interacción se definió como  $V_0 = -(z_1/a)^2$ , donde  $z_1$  es el primer cero de la función Bessel  $J_0$ , y  $a$  es un parámetro el cual puede tomar cualquier valor. Al dar un valor de  $a$ , se calcula  $V_0$ , lo cual determina a su vez la longitud de dispersión  $\alpha$ .
- (ii) La amplitud del potencial de interacción es función de la longitud de dispersión,  $V_0 = V_0(\alpha)$ , por lo que se puede obtener una expresión de la amplitud del potencial para cualquier valor de la longitud de dispersión, la cual es

$$V_0 = \left( \frac{2}{r_v} \frac{P_1 \left( \frac{2|\alpha|}{r_v} \right)^{P_2}}{P_3 + \left( \frac{2|\alpha|}{r_v} \right)^{P_2}} \right)^2. \quad (5.120)$$

Los detalles de como se obtiene esta expresión se muestran en el Apéndice C.

Una vez conocido  $V_0$ , junto con el valor medio de la Ec. (5.119), se calcula el valor del hamiltoniano  $\tilde{H}_2$ . Al obtener los valores del valor medio de  $\tilde{H}_1$  y  $\tilde{H}_2$  se evalúa el valor medio de la energía para la región BCS débilmente interactuante.

Las funciones de onda descritas en esta sección, son una buena elección para poder determinar el valor de la energía en el lado BCS para valores donde  $1/k_F\alpha > 0.5$ . En la siguiente sección se describen las funciones de onda con las cuales se determinará el valor de la energía para la región BCS donde  $1/k_F\alpha < 0.5$  y la región BEC.

### 5.3.2 Funciones de onda prueba tipo Eagles-Leggett.

En la sección 2.2 se mencionó la teoría desarrollada por Leggett [78] que considera las ideas de Eagles [77], sobre la construcción de una función de onda de muchos cuerpos formada por pares de partículas:

$$\Psi_{\lambda_{EL}} = \mathcal{A} [\phi(1_{\uparrow}, 1_{\downarrow})\phi(2_{\uparrow}, 2_{\downarrow})\dots\phi(N_{\uparrow}, N_{\downarrow})], \quad (5.121)$$

donde  $\mathcal{A}$  es el operador de antisimetrización el cual garantiza el comportamiento adecuado de la función de onda ante el intercambio de partículas. Esta función de onda se puede aplicar no sólo en el límite gases de Fermi interactuando débilmente; sino también en el régimen de interacción fuerte, pues una función de tipo BCS puede eventualmente describir el estado base de los fermiones desde la región de pares de Cooper hasta la región BEC de estados moleculares.

Para la región del cruce y la región BEC, proponemos una función de onda prueba,  $\phi(i_{\uparrow}, j_{\downarrow}) \equiv \phi(\vec{r}_{i_{\uparrow}}, \vec{r}_{j_{\downarrow}})$ , formada por pares de partículas, la cual depende de un solo parámetro variacional  $\lambda_{EL}$ , dicha función de onda es:

$$\phi(\vec{r}_{i_{\uparrow}}, \vec{r}_{j_{\downarrow}}) \cong \varphi(r_{ij})e^{-\lambda_{EL}|\vec{r}_{i_{\uparrow}}+\vec{r}_{j_{\downarrow}}|^2/4}. \quad (5.122)$$

$\varphi(r)$  es la solución del problema de dos cuerpos para la coordenada relativa cuando  $\alpha > 0$ , Ec. 4.27 de la sección 4.2:

$$\varphi(r_{ij}) = \frac{v((b\sqrt{V_0 m}/\hbar)e^{-r_{ij}/b}) \exp(-m\omega r_{ij}^2/\hbar)g(r_{ij})}{r_{ij}}, \quad r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|,$$

El parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  modula el tamaño óptimo de la nube. Al utilizar la función de onda, Ec. (5.121), con la base dada por la Ec. (5.122) se garantiza que la dinámica del método Monte-Carlo estará guiada por los efectos tanto de los pares de partículas de la coordenada relativa  $\vec{r}_{i,j} = \vec{r}_{i_{\uparrow}} - \vec{r}_{j_{\downarrow}}$ , como por las coordenadas del centro de masa  $\vec{R}_{ij} = (\vec{r}_{i_{\uparrow}} + \vec{r}_{j_{\downarrow}})/2$ .

Cabe mencionar que a diferencia de otros cálculos realizados para un gas de Fermi homogéneo [51, 53], al incluir de forma explícita las características inhomogéneas del gas podemos explorar los átomos atrapados en su conjunto conforme éstos evolucionan en el régimen interactuante. Además, no se exploran opciones de funciones de onda variacionales para cada partícula como en la aproximación de campo medio, sino que se busca el efecto global de la interacción de la función de onda de las partículas apareadas.

El algoritmo que se describió en la sección anterior para encontrar el valor medio de la energía, no se puede utilizar para las funciones de onda del régimen BEC y del cruce porque aquéllas dependen de la estructura de la función de onda de Jastrow-Slater. Para poder calcular el valor medio de la energía media, de forma que facilite el cálculo Monte-Carlo, se aprovecha la estructura de la función de onda de dos cuerpos  $\phi$ ; por lo que la función de onda antisimetrizada, Ec. (5.121) se puede escribir explícitamente de la siguiente forma:

$$\Psi_{\lambda_{EL}} = \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{i=1}^N \phi(i, \mathcal{P}(i)), \quad (5.123)$$

donde  $i$  denota la posición de la partícula  $i$  de una especie,  $\vec{r}_{i\uparrow}$ , y  $\mathcal{P}$  denota las permutaciones de la partícula  $i$  en la posición  $\vec{r}$  de la otra especie  $\vec{r}_{\mathcal{P}(i)\downarrow}$ , la suma en la Ec. (5.123) se toma sobre todas las posibles permutaciones  $\mathcal{P}$  del conjunto  $\downarrow$ . Las funciones de onda  $\phi(i, \mathcal{P}(i))$  son de la forma dada por la Ec. (5.122). Al escribir el hamiltoniano Ec. (5.94) en términos de permutaciones, éste se puede escribir como una suma de pares de partículas, donde se usa las coordenadas del centro de masa y relativas de los posibles pares, como se muestra a continuación [160]:

$$\begin{aligned} H = & \sum_i^N \left[ \frac{P_{i, \mathcal{P}_0(i)}^2}{2\mu} + \frac{\mu}{2} \omega^2 r_{i, \mathcal{P}_0(i)}^2 + V_{i, \mathcal{P}_0(i)}(r_{i, \mathcal{P}_0(i)}) \right. \\ & \left. + \frac{P_{i, \mathcal{P}_0(i)}^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega^2 R_{i, \mathcal{P}_0(i)}^2 \right] + \sum_{i, j \neq \mathcal{P}_0(i)} V(r_{i, j}), \end{aligned} \quad (5.124)$$

donde  $\mathcal{P}_0$  es cualquier permutación.

La ecuación (5.123) así como la forma explícita de la función de onda de dos cuerpos Ec. (5.122), permite escribir el hamiltoniano  $H$  aplicado a la función de onda  $\Psi_{\lambda_{EL}}$  de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} H\Psi_{\lambda_{EL}} = & \left[ N\epsilon_0 + N \frac{3\hbar\omega\lambda_{EL}}{2} \right] \Psi_{\lambda_{EL}} \\ & + (1 - \lambda_{EL}^2) \sum_{i, \mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \frac{M}{2} \omega^2 R_{i, \mathcal{P}(i)}^2 \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) \\ & + \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \sum_{i, j \neq \mathcal{P}(i)} V(r_{i, j}) \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)), \end{aligned} \quad (5.125)$$

donde  $\epsilon_0$  es la eigenenergía del estado base del problema de dos cuerpos. Utilizando que

$$\begin{aligned} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \sum_{i,j \neq \mathcal{P}(i)} V(r_{i,j}) \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) &= \sum_{\mathcal{P}} \sum_{i,j} V(i,j) (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) \\ &- \sum_{\mathcal{P}} \sum_{i,j \neq \mathcal{P}(i)} V(i, \mathcal{P}(i)) (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)), \end{aligned}$$

se obtiene:

$$\begin{aligned} H\Psi_{\lambda_{EL}} &= \left[ N\epsilon_0 + N \frac{3\hbar\omega\lambda_{EL}}{2} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right] \Psi_{\lambda_{EL}} \\ &+ \sum_{i,\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{l \neq i}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) \cdot \left[ (1 - \lambda_{EL}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,\mathcal{P}(i)}^2 \right. \\ &\left. - V(r_{i,\mathcal{P}(i)}) \right] \phi(i, \mathcal{P}(i)). \end{aligned} \quad (5.126)$$

La función de onda  $\Psi_{\lambda_{EL}}$  se escribe en términos de los menores  $C_{im}(\Psi_{\lambda_{EL}})$ :

$$\Psi_{\lambda_{EL}} = \sum_{m=1}^N C_{im}(\Psi_{\lambda_{EL}}) \phi_{i,m}, \quad (5.127)$$

donde  $\phi_{i,m}$  representa cualquiera de las funciones de onda de la  $i$ -ésima fila del determinante. Sustituyendo la expresión para  $\Psi_{\lambda_{EL}}$  dada por la Ec. (5.127), se obtiene la siguiente expresión para  $H\Psi_{\lambda_{EL}}$ :

$$\begin{aligned} H\Psi_{\lambda_{EL}} &= \left[ N\epsilon_0 + N \frac{3\hbar\omega\lambda_{EL}}{2} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right] \Psi_{\lambda_{EL}} \\ &+ \sum_{i,m} C_{i,m} \cdot \left[ (1 - \lambda_{EL}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,m}^2 - V(r_{i,m}) \right] \phi(i, m). \end{aligned}$$

Para poder simplificar un poco más la ecuación anterior, de tal forma que se puedan programar en la simulación Monte-Carlo, se utiliza la relación entre los menores y los elementos de la inversa de la matriz transpuesta [159] la cual es:

$$\bar{\phi}_{i,m} \equiv (\phi^T)_{im}^{-1} = \frac{C_{m,i}(\Psi_{\lambda_{EL}}^T)}{\Psi_{\lambda_{EL}}^T} = \frac{C_{i,m}(\Psi_{\lambda_{EL}})}{\Psi_{\lambda_{EL}}}. \quad (5.128)$$

obteniendo así la siguiente expresión para  $H\Psi_{\lambda_{EL}}$ :

$$\begin{aligned} H\Psi_{\lambda_{EL}} &= \left[ N\epsilon_0 + N \frac{3\hbar\omega\lambda_{EL}}{2} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right. \\ &\left. + \sum_{i,m} \phi_{i,m} \bar{\phi}_{i,m} \left[ (1 - \lambda_{EL}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,m}^2 - V(r_{i,m}) \right] \right] \Psi_{\lambda_{EL}}. \end{aligned} \quad (5.129)$$

La ecuación anterior indica una forma apropiada para evaluar la acción del hamiltoniano  $H$  a la función variacional de muchos cuerpos  $\Psi_{\lambda_{EL}}$ . En la simulación Monte-Carlo se evalúa el valor medio del hamiltoniano  $\langle \Psi_{\lambda_{EL}} | H | \Psi_{\lambda_{EL}} \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\lambda_{EL}} | H | \Psi_{\lambda_{EL}} \rangle &= N\epsilon_0 + N \frac{3\hbar\omega\lambda_{EL}}{2} + \Psi_{\lambda_{EL}} \left[ \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i,m}^N \phi_{i,m} \bar{\phi}_{i,m} \left[ (1 - \lambda_{EL}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,m}^2 - V(r_{i,m}) \right] \right] \Psi_{\lambda_{EL}}. \quad (5.130) \end{aligned}$$

para obtener el valor óptimo de  $\lambda_{EL}$  y la correspondiente energía.

En el Apéndice D se describe la estructura del programa Monte-Carlo con el cual se desarrollaron los cálculos para el sistema de muchos cuerpos para la región del cruce BCS-BEC y la región BEC.



# CAPÍTULO 6

## Resultados numéricos para las regiones BEC, BCS y el cruce.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de la simulación Monte-Carlo descrita en la sección anterior, utilizando las diferentes funciones de onda propuestas para las regiones BCS, BEC y el cruce. También se muestra un análisis de las diferentes propiedades que tiene el gas en cada una de estas regiones como lo son las densidades y correlaciones, y el teorema del virial para gases ultrafríos.

En la primera sección, dado un alcance del potencial  $r_v$ , se reporta la energía del sistema, para diferentes valores de la longitud de dispersión  $\alpha$ ; éstos resultados se muestran a través de una familia de curvas de energías las cuales se realizaron para diferente número de partículas. Para el caso en particular de  $N = 165$  partículas por cada especie, se presentan curvas de energía para diferentes valores del alcance del potencial.

En la sección dos, se describe el teorema del virial para gases ultrafríos tanto en el régimen de unitariedad, que corresponde a la región donde la longitud de dispersión diverge, como en las regiones BEC y BCS. Se presenta un análisis de los efectos debido a que la interacción es de corto alcance.

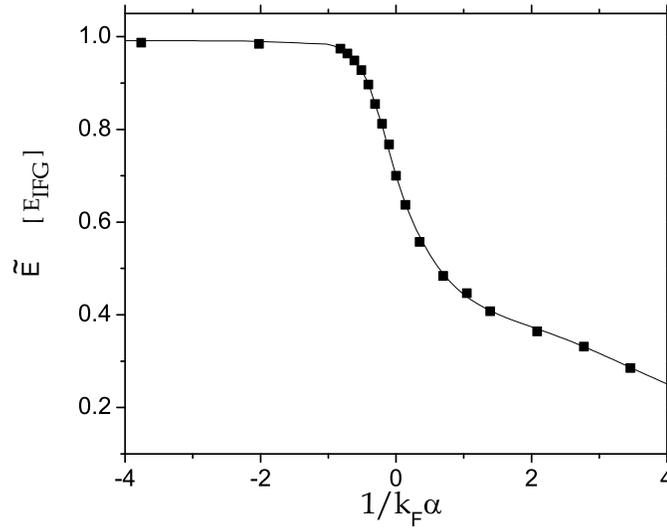
En la sección tres se describen algunas otras propiedades del gas de Fermi, en particular las densidades y correlaciones de dos puntos para cada región y el comportamiento del gas de Fermi en el límite de unitariedad. En particular calculamos un factor conocido como parámetro de Bertsch que relaciona la energía del gas de Fermi atrapado e interactuante con la energía del gas de Fermi ideal atrapado. Finalmente, en la última sección, se analiza el límite cuando el alcance del potencial tiende a cero.

## 6.1 Curvas de energía.

Las simulaciones Monte-Carlo se hicieron para  $N_{\uparrow}$  partículas con espín hacia arriba y  $N_{\downarrow}$  átomos con espín hacia abajo. Nosotros consideramos el caso en el que el número de partículas en cada estado es el mismo,  $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = N$ , por lo que en total se tienen  $2N$  átomos. En todos los resultados presentados en esta tesis, el valor de  $N$  se escogió de tal manera que el número de partículas sea exactamente el correspondiente a una capa cerrada  $\mathcal{M}_{\mathcal{F}}$  del sistema no interactuante, y los valores de la longitud de dispersión se escogieron de tal forma que se encuentran alrededor de la condición de la primera resonancia  $(z_0\hbar/b)^2/m = |V_0|$ . Para hacer los cálculos consideramos diversos valores del alcance del potencial  $r_v$ , dependiendo de la región analizada, por lo general utilizamos los siguientes valores:  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.001, 0.002, 0.0025, 0.00375, 0.005, 0.01, 0.015$  y  $0.02$ . Dado un valor en particular del alcance del potencial,  $r_v$ , se escogen diferentes valores de la longitud de dispersión  $\alpha$ , que abarquen las regiones BCS, BEC y el cruce; lo cual fija los valores de la amplitud de potencial  $V_0$  y de la eigenenergía del sistema de dos cuerpos  $\epsilon_n^{r_v}$ . Para hacer el muestreo estadístico del sistema, se utilizan del orden de  $\sim 10^4$  pasos para la toma de los datos, y del orden de  $\sim 10^3$  pasos para la termalización del sistema. Para realizar las simulaciones numéricas, se utilizó el *cluster Ollin* del Instituto de Física.

De la simulación Monte-Carlo, obtenemos la energía por partícula, y el valor del parámetro variacional que minimiza la energía para cada región, ya sea  $\tilde{\omega}$ ,  $\lambda_{EL}$ , o  $\lambda_J$ . En el Apéndice E se muestra un ejemplo de la salida típica del programa, donde además se muestran las contribuciones de la energía cinética, potencial y de la interacción, además de los parámetros que determinan el valor de la longitud de dispersión, como  $V_0$ ,  $r_v$ , los pasos, la termalización, y la semilla que se utiliza para la simulación. Para escoger el valor de la energía mínima se hacen diferentes corridas, en las que se cambia el valor semilla, y se determina la región del parámetro variacional donde la energía es mínima, obteniendo de esta forma el valor del parámetro variacional óptimo y la energía mínima. Una vez obtenido el valor de la energía mínima se verifica que sea reproducible para diferentes valores de la semilla.

Los resultados se obtuvieron para diferente número de partículas  $N$  de cada especie, como se muestra al final de esta sección. En el caso particular de la capa  $\mathcal{M}_{\mathcal{F}} = 8$ , que corresponde a  $N = 165$  partículas, se realizó un análisis más exhaustivo de la energía del sistema, se escogió este valor debido a que es un número relativamente grande de partículas en el cual los cálculos se realizan en un tiempo largo pero razonable. Para este valor en particular se realizaron simulaciones utilizando diferente estadística, ya sea, 10000, 15000, 20000 y 30000 con la correspondiente termalización 2000, 3000, 4000, 6000. Los alcances del potencial utilizados son  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.002, 0.0025, 0.00375, 0.005, 0.01$  y  $0.015$ . En la Figura 6.1 se muestra la curva de energía para un alcance de  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ , como función de  $1/k_F\alpha$ , el rango de este parámetro se enfocó en la región  $-1/k_F\alpha \in (-4, 4)$ , esta curva de energía se hizo utilizando  $\sim 10^4$  realizaciones o pasos de las configuraciones en el Método Metrópolis. Al aumentar el número de pasos que se denotarán por la estadística,



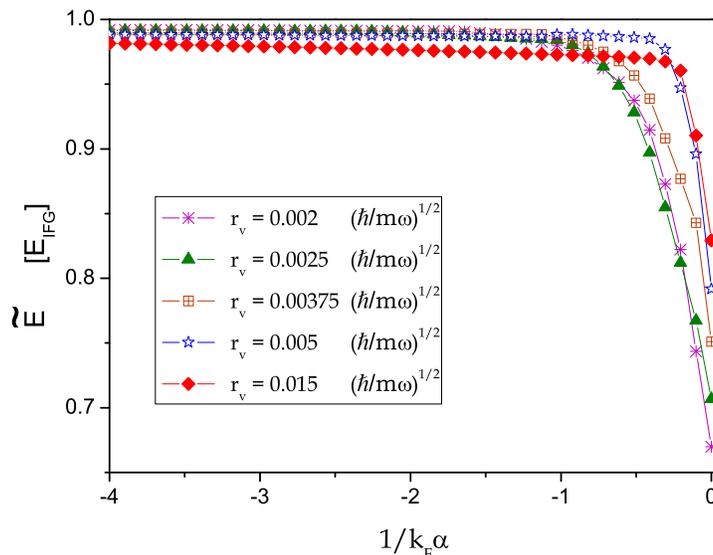
**Figura 6.1:** Energía de muchos cuerpos  $\tilde{E}$ , como función de  $1/k_F \alpha$  para un alcance  $r_v = 0.0025 \sqrt{\hbar/m\omega}$ . La energía se mide en unidades del gas de Fermi no interactuante y atrapado  $E_{IFG}$ .

se obtiene una optimización del mínimo de la energía, lo que conduce a que los errores de la energía disminuyan. En el caso de esta Figura, la barra de error es del orden o menor que el tamaño de los puntos graficados, en particular para la Región BCS las barras de error son del orden de 0.01, mientras que para la región BEC éstas abarcan los valores entre 0.003 y 0.01. La línea sólida que se muestra en la Figura 6.1 es la interpolación a estos datos. Debido a que en la región donde  $\alpha > 0$  la energía de ligadura del estado base del problema de dos cuerpos  $\epsilon_0^{(r_v)}$  puede ser muy grande para ciertos valores de la longitud de dispersión, sobre todo cuando  $1/k_F \alpha \gg 1$ , se utiliza la siguiente definición para la energía por partícula:

$$\tilde{E} = \begin{cases} \frac{E}{2N} & \text{si } \alpha < 0, \\ \frac{E}{2N} - \frac{\epsilon_0^{(r_v)}}{2} & \text{si } \alpha > 0, \end{cases} \quad (6.1)$$

la cual se utilizará para reportar los resultados.

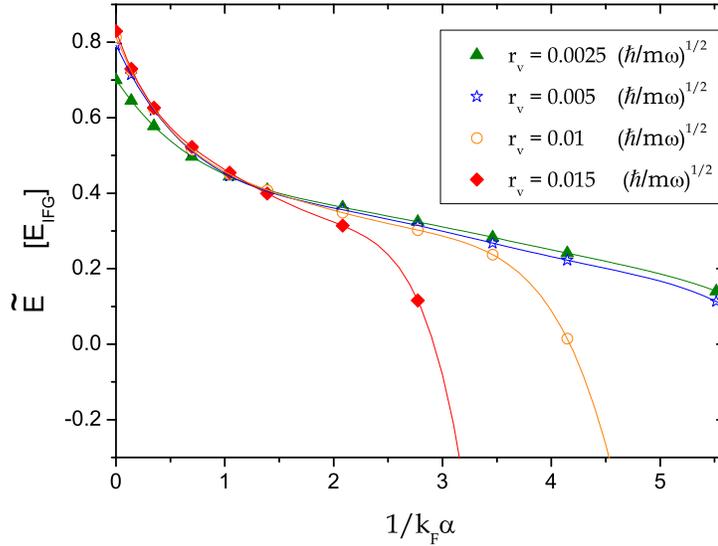
En la Figura 6.1, se pueden distinguir tres regiones, la región BCS donde  $1/k_F \alpha \rightarrow -\infty$ , en este caso hasta  $1/k_F \alpha = -4$ , la región BEC donde  $1/k_F \alpha \rightarrow \infty$ , en este caso hasta  $1/k_F \alpha = 4$ , y el cruce BCS-BEC, que corresponde a la región cercana a  $1/k_F \alpha \rightarrow 0$ . La energía variacional, para aquellos valores de la región BCS, donde  $1/k_F \alpha < -0.5$ , se puede obtener por medio de la función de Jastrow o mediante la función de onda dada por el producto de determinantes de Slater, con  $\omega'$  como parámetro variacional, dada por la Ec. (5.114) del Capítulo anterior, nosotros utilizamos esta última opción. La razón de



**Figura 6.2:** Energía por partícula  $\tilde{E}$ , como función de  $1/k_F\alpha$  en la región BCS, para diferentes alcances  $r_v = 0.002, 0.0025, 0.00375, 0.005$  y  $0.015 \sqrt{\hbar/m\omega}$ . La energía se mide en unidades del gas de Fermi no interactuante y atrapado  $E_{IFG}$ .

utilizar esta función de onda es que para potenciales de corto alcance, con la función de onda de Jastrow-Slater propuesta se obtienen energías variacionales mínimas pero altas, esto es debido a que el alcance del potencial que se utiliza es pequeño, y las funciones de Jastrow son apropiadas para describir interacciones de largo alcance [158]. Para la región BCS donde el valor de longitud de dispersión cumple que  $1/k_F\alpha \in (-0.52, 0)$  y la región BEC, se utilizó la función tipo Eagles-Leggett, Ec. (5.121), junto con la función de dos cuerpos dada por la ecuación (5.122), donde  $\varphi(r_{i,j})$  es la función analítica propuesta para la función de onda de dos cuerpos, que corresponde a la ecuación (4.27) en el caso que la longitud de dispersión sea positiva o la ecuación (4.28) cuando la longitud de dispersión es negativa. Cabe mencionar que el punto donde  $\alpha = -0.515082$  es un punto donde es difícil encontrar el valor mínimo de la energía, la razón es porque en ese punto se considera que empieza la región del cruce y además es el punto de transición hacia la fase superflúida. Esto puede ser un indicio de que la función de onda prueba podría ser mejorada para describir con mayor precisión la transición.

Una vez que se obtiene los valores de la energía apropiadas para cada región, se obtuvieron curvas de energías análogas a las reportadas en la Figura 6.1 para diferentes valores del alcance del potencial. Por ejemplo, en la Figura 6.2 se muestran las curvas de energía para la región BCS como función del parámetro  $1/k_F\alpha$ ; para esta región se exploraron los valores del alcance del potencial  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.015, 0.005, 0.00375, 0.0025$  y  $0.002$ .

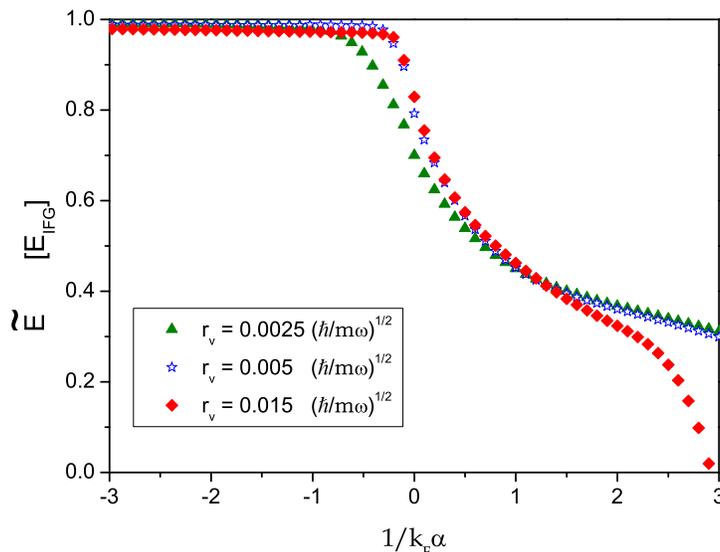


**Figura 6.3:** Energía por partícula  $\tilde{E}$ , como función de  $1/k_F\alpha$  en la región BEC, para diferentes alcances  $r_v = 0.0025, 0.005, 0.01, \text{ y } 0.015 \sqrt{\hbar/m\omega}$ . La energía se mide en unidades del gas de Fermi no interactuante y atrapado  $E_{IFG}$ .

Mientras que en Figura 6.3, se muestran las curvas de energías como función de  $1/k_F\alpha$  obtenidas para la región BEC, donde se utilizaron los siguientes valores del alcance del potencial  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.015, 0.01, 0.005$  y  $0.0025$ . En esta región, se observa que para el caso donde  $1/k_F\alpha \gg 1$  hay un colapso en el valor en la energía, es decir ésta presenta valores negativos, lo cual se espera pues el gas es un gas molecular modelado por un potencial de interacción completamente atractivo y donde la longitud de dispersión es positiva. Los valores para los cuales se presenta el colapso de la energía corresponden a aquéllos donde el parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  es mayor que uno; cabe mencionar que en esta región existen valores mínimos de la energía. Finalmente, en la Figura 6.4 se muestran curvas para todas las regiones para los alcances  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.015, 0.005$  y  $0.0025$ . En esta figura se observa el comportamiento conjunto de la energía del gas de Fermi, incluido el colapso de la región BEC.

El otro parámetro que se obtiene a partir de las simulaciones Monte-Carlo es el parámetro variacional  $\omega'$ , o  $\lambda_{EL}$ , con el cual se determinan las funciones de onda para cada región. A continuación se muestran tres tablas donde se reportan algunos valores de estos parámetros variacionales, dependiendo de la región analizada.

En la Tabla 6.1 se muestra el parámetro variacional  $\tilde{\omega} = \omega'/\omega$ , que se obtuvo para región BCS donde  $-1/k_F\alpha < -0.5$ , así como también se reporta la amplitud del potencial y el valor de la energía, para ciertos valores de  $1/k_F\alpha$ . En la Tabla 6.2 se reporta el



**Figura 6.4:** Energía por partícula  $\tilde{E}$ , como función de  $1/k_F\alpha$  para diferentes alcances  $r_v = 0.0025, 0.005, 0.01, \text{ y } 0.015 \sqrt{\hbar/m\omega}$ . La energía se mide en unidades del gas de Fermi no interactuante y atrapado  $E_{IFG}$ .

valor del parámetro  $\lambda_{EL}$ , que se utilizó en la región BCS así como la correspondiente energía y la amplitud del potencial. Finalmente en la Tabla 6.3 se reportan el parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  para la región BEC donde se observa que para el último valor de esta tabla el parámetro  $\lambda_{EL}$  es mayor que uno.

A continuación, se muestran las curvas de energía para diferentes números de partículas donde se hizo un estudio menos exhaustivo del sistema. Los resultados se obtuvieron para  $N = 35, 56, 84, 120$  y  $165$  partículas de cada especie y el alcance del potencial con el que se obtuvieron estas curvas de energía es  $r_v = 0.015 \sqrt{\hbar/m\omega}$ .

En la Figura 6.5 se muestran las curvas de energía  $\tilde{E}$  para diferente número de partículas como función de  $1/k_F\alpha$ . Para hacer cada curva se escogieron entre 8 o diez valores de la longitud de dispersión, por cada región. La energía reportada es el promedio de las energías mínimas para cada valor del parámetro variacional. La barra de error asociada a cada punto considera el proceso de minimización así como los efectos de las condiciones iniciales que no se termalizaron. Las energías del sistema están normalizadas mediante el factor  $\epsilon_N$  el cual se define como  $\epsilon_N = \tilde{E}(\alpha_-) - \tilde{E}(\alpha_+)$ ; donde  $\tilde{E}(\alpha_-)$  es el valor asintótico de la energía por partícula para longitudes de dispersión negativas mientras que  $\tilde{E}(\alpha_+)$  corresponde a la energía por partícula para longitudes de dispersión positivas. En la Figura  $\alpha^+ = 0.012\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Hacer esta normalización permite encontrar una curva universal para la energía en la región BCS, BEC y el cruce, la cual es independiente del número de

$1/k_F\alpha$	$r_v = 0.0025$			$r_v = 0.015$		
	$V_0$	$\omega'/\omega$	$E/2N$	$V_0$	$\omega'/\omega$	$E/2N$
	$[\hbar\omega]$		$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$		$[\hbar\omega]$
-15.9987	156391.656	1.00806517	7.45113	1597.960	1.01113141	7.44161
-9.55147	180412.212	1.00932455	7.44358	2309.624	1.01624629	7.41531
-4.28591	205669.440	1.01065484	7.43563	3607.543	1.02584001	7.36685
-2.12024	217976.591	1.01130532	7.43175	4661.115	1.03389313	7.32703
-1.05919	224486.727	1.01165001	7.4297	5417.215	1.03982743	7.29818
-0.447963	228391.289	1.01185694	7.42847	5961.892	1.04418597	7.27725

**Tabla 6.1:** Algunos valores del parámetro variacional  $\omega'$  en la región BCS, para los alcances del potencial  $r_v = 0.0025$  y  $r_v = 0.015$ .

$1/k_F\alpha$	$r_v = 0.0025$			$r_v = 0.0075$		
	$V_0$	$\lambda_{EL}$	$E/2N$	$V_0$	$\lambda_{EL}$	$E/2N$
	$[\hbar\omega]$		$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$		$[\hbar\omega]$
-0.2296	229850.0	$0.143 \pm 0.0086$	$6.17 \pm 0.12$	101829.9	$0.149 \pm 0.0042$	$6.64 \pm 0.02$
-0.1032	230661.7	$0.162 \pm 0.0084$	$5.76 \pm 0.12$	102368.9	$0.154 \pm 0.0108$	$6.32 \pm 0.04$
-0.0383	231079.5	$0.182 \pm 0.0038$	$5.60 \pm 0.12$	102647.0	$0.163 \pm 0.0110$	$6.06 \pm 0.07$
0	231327.4	$0.183 \pm 0.0046$	$5.3 \pm 0.06$	102812.2	$0.179 \pm 0.0099$	$5.63 \pm 0.09$

**Tabla 6.2:** Algunos valores del parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  en la región BCS, junto con el valor de unidad  $1/k_F\alpha = 0$ .

partículas [57]. Aunque esta normalización permite encontrar una curva universal, sólo se utiliza en esta figura, puesto que los cálculos en los que se enfoca la tesis se presentan para un número particular de átomos, como lo es  $N = 165$ , debido a esta razón los resultados se presentan para  $\tilde{E}$ .

En la Figura 6.5 también se puede notar lo siguiente: En la región BCS, la energía total, que es la suma de la energía de interacción y la energía de confinamiento, es muy parecida a la energía de Fermi, lo cual indica que la contribución de la energía de interacción es pequeña. En el límite que  $k_F\alpha \ll 1$ , la energía variacional obtenida es similar a la obtenida por medio de un potencial efectivo de contacto, mientras que conforme  $|\alpha| \rightarrow \infty$  el efecto de la interacción empieza a dominar en la contribución de la energía. En la región BEC, no se observa el colapso de la energía debido a que para estas simulaciones no utilizamos valores del parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  mayores que uno. En general, para valores del parámetro variacional donde  $\lambda_{EL} > 1$ , y  $1/k_F\alpha > 1$  los valores de la energía ya son negativos

$r_v = 0.0025$					$r_v = 0.005$				
$1/k_F\alpha$	$E/2N$	$\lambda$	$\epsilon_0$	$V_0$	$1/k_F\alpha$	$E/2N$	$\lambda$	$\epsilon_0$	$V_0$
0.13959	4.84	0.193	-0.3905	232255.53	0.17861	5.2	0.142	-0.6145	58414.55
0.34876	4.33	0.187	-2.4582	233658.17	0.35687	4.62	0.16	-2.4876	59006.08
0.69684	3.73	0.198	-9.9502	236024.32	0.71241	3.79	0.185	-10.1907	60216.43
1.04427	3.33	0.27	-22.6562	238426.59	1.41996	3.01	0.415	-42.7912	62751.58
2.08293	2.72	0.6	-93.9576	245857.62	2.12375	2.64	0.46	-101.1647	65450.27
2.77266	2.43	0.72	-171.1576	251006.34	2.82508	2.32	0.48	-189.1681	68326.87
3.4605	2.12	0.65	-274.0998	256318.49	3.52553	1.97	0.74	-311.2289	71397.36
5.51634	1.165	1.465	-756.6431	261801.08	5.51634	0.8	1.12	-932.5641	82001.12

Tabla 6.3: Parámetro variacional  $\lambda_{EL}$  en la región BEC.

## 6.2 Teorema del virial para gases ultrafríos confinados.

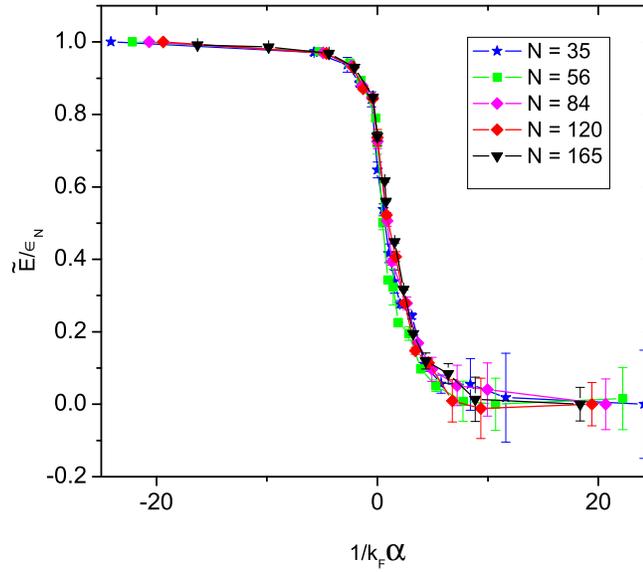
En esta sección se presenta el teorema del virial para gases atómicos ultrafríos confinados; el cual relaciona la energía total por partícula con la energía de atrapamiento [161]. Las relaciones del virial establecen conexiones entre la energía total y las variables que definen al hamiltoniano del sistema [162–164]. Basado en las ideas desarrolladas en la Referencia [162], se obtiene una expresión para las relaciones del virial, en el caso de un potencial de corto alcance, como lo es el potencial de interacción exponencial, las cuales dependen de la longitud de dispersión y del alcance del potencial. Se reportan resultados numéricos donde se verifican estas relaciones para el caso de un gas de Fermi de dos componentes confinado e inerte, en el cual hay 165 partículas por cada estado hiperfino.

### 6.2.1 Relaciones del virial para un potencial de corto alcance.

En ausencia de la interacción, el teorema del virial relaciona la energía por partícula del gas atómico confinado con el potencial de atrapamiento. Si ese potencial es armónico el teorema establece que la energía total por partícula es el doble que la energía promedio del potencial de confinamiento

$$E = 2E_{tr}. \quad (6.2)$$

Para un gas de Fermi de dos componentes fuertemente interactuante y confinado por medio de una trampa armónica en el límite de unitariedad, se encontró que esta relación es válida tanto experimental como teóricamente [26, 27, 161]. La primera derivación que se hizo sobre este teorema consideró las interacciones de rango cero, la aproximación de la densidad local y argumentos termodinámicos [161]. Las siguientes derivaciones del teorema del virial en el límite de unitariedad, revelan ciertas características del gas unitario como los son sus propiedades de escalamiento [27] o un mapeo, usando teoría de grupos, entre el problema en el espacio libre y el atrapado [165]. En el año de 2008, se utilizó el teorema de Hellmann-Feynman para probar la Ec. (6.2) en el límite de unitariedad [164, 166], y



**Figura 6.5:** Energía variacional por partícula  $E/2N - \epsilon_b/2$  como función de  $1/k_F \alpha$  para diferente número de partículas,  $N=35, 56, 84, 120, 165$ .

para generalizar las relaciones del virial para longitudes de dispersión finitas [162,163]. De hecho, se puede considerar cualquier forma del potencial de confinamiento e interacciones de rango finito a través de un teorema del virial generalizado el cual puede enunciarse de la siguiente manera [162]:

Se considera un hamiltoniano para un sistema de  $N$  partículas con estadística arbitraria:

$$H = H' + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (6.3)$$

donde  $H'$  y su dominio dependen de  $p$  parámetros con unidades de longitud  $\ell_1, \dots, \ell_p$ , de  $\hbar$  y de la masa de las partículas.  $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  denota una función arbitraria que permite que los dominios de  $H$  y  $H'$  coincidan,  $\vec{r}_i$  es el vector posición para la  $i$ -ésima partícula. Para estas condiciones las relaciones del virial son:

$$E = \left\langle U + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \nabla_{\vec{r}_i} U \right\rangle - \frac{1}{2} \sum_{q=1}^p \ell_q \frac{\partial E}{\partial \ell_q}, \quad (6.4)$$

con  $E$  la energía total. Para poder derivar la ecuación anterior se procede de la siguiente forma:

Utilizando un análisis dimensional, la función  $U$  y la energía se pueden escribir de la siguiente manera:

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{\hbar^2 \zeta^2}{m} f(\zeta \vec{r}_1, \dots, \zeta \vec{r}_N), \quad (6.5)$$

$$E(\ell_1, \dots, \ell_p, [U]) = \frac{\hbar^2 \zeta^2}{m} F(\zeta \ell_1, \dots, \zeta \ell_p, [f]), \quad (6.6)$$

donde  $\zeta$  tiene la dimensión del inverso de longitud,  $f$  y  $F$  son funciones adimensionales, y  $\ell_1, \dots, \ell_p$  son parámetros fijos.

Se utiliza el Teorema de Hellmann-Feynmann, el cual relaciona la derivada de la energía respecto a un parámetro con el valor esperado de la derivada del hamiltoniano respecto al mismo parámetro, para lo cual se necesita conocer un eigenestado  $|\psi\rangle$  del sistema, y es válido si la derivada  $\partial|\psi\rangle/\partial\zeta$  pertenece al dominio de  $H$ :

$$\frac{\partial E_n}{\partial \zeta} = \left\langle \psi \left| \frac{\partial H}{\partial \zeta} \right| \psi \right\rangle,$$

En el caso de este sistema descrito por el hamiltoniano  $H$  se obtiene:

$$\zeta \frac{\partial E}{\partial \zeta} = \zeta \left\langle \frac{\partial H}{\partial \zeta} \right\rangle = \zeta \left\langle \frac{\partial H'}{\partial \zeta} \right\rangle + \zeta \left\langle \frac{\partial U}{\partial \zeta} \right\rangle. \quad (6.7)$$

Sustituyendo la expresión adimensional de la función  $U$  mostrada en la ecuación (6.5) en la ecuación (6.7) se obtiene:

$$\zeta \frac{\partial E}{\partial \zeta} = \left\langle 2U + \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \nabla_{\vec{r}_i} U \right\rangle. \quad (6.8)$$

Por otro lado se calcula la derivada de la energía respecto a  $\zeta$  utilizando la ecuación (6.6), obteniendo:

$$\zeta \frac{\partial E}{\partial \zeta} = 2E + \sum_{q=1}^p \ell_q \frac{\partial E}{\partial \ell_q}. \quad (6.9)$$

Al igualar las ecuaciones (6.8) y (6.9) se obtiene el teorema del virial generalizado dado por la ecuación (6.4).

Para poder recuperar la expresión del teorema del virial, Ec. (6.2), se aplica el teorema del virial generalizado al caso en el que el operador  $H'$  de la ecuación (6.3) es la energía cinética  $H' = T$ ,

$$T = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_{r_i},$$

donde  $m_i$  es la masa de la partícula  $i$  y donde el dominio del hamiltoniano es un conjunto de funciones de onda que no depende de la escala de longitud.

En el caso que se estudian partículas confinadas, la función  $U$  es la suma de los potenciales de confinamiento:

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}_i), \quad (6.10)$$

siendo en este caso el teorema del virial generalizado, Ec. (6.4):

$$E = 2\tilde{E}_{tr} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^p \ell_q \frac{\partial E}{\partial \ell_q}, \quad (6.11)$$

donde

$$\tilde{E}_{tr} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\langle U_i(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \vec{r}_i \cdot \nabla U_i(\vec{r}_i) \right\rangle. \quad (6.12)$$

Cuando cada potencial  $U_i$  es un potencial armónico,  $U = \sum_i^N m(\omega_x^2|x_i|^2 + \omega_y^2|y_i|^2 + \omega_z^2|z_i|^2)/2$ , la energía  $\tilde{E}_{tr}$  es igual a la energía potencial de confinamiento  $E_{tr} = \langle U \rangle$ . Por lo que la Ec. (6.11) se convierte en

$$E = 2E_{tr} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^p \ell_q \frac{\partial E}{\partial \ell_q}. \quad (6.13)$$

### 6.2.2 Relaciones del virial para el potencial exponencial.

Como se mencionó en el Capítulo Cinco, el sistema estudiado en la presente tesis, consiste de  $2N$  átomos fermiónicos en diferentes estados hiperfinos confinados por medio de una trampa armónica isotrópica tridimensional de frecuencia  $\omega$ , y que interactúan por medio de un potencial atractivo de rango finito  $V = -|V_0|e^{-r/r_v}$ . En el caso de onda- $s$ , el hamiltoniano del sistema está descrito en la ecuación (5.94) del Capítulo anterior. Este potencial está caracterizado por dos parámetros, la intensidad  $V_0$  y el alcance del potencial  $r_v$ . Cuando la energía cinética de los átomos es lo suficientemente baja, la longitud de dispersión es el parámetro adecuado para describir al sistema interactuante. Para un número dado de estados ligados y un alcance del potencial  $r_v$  dado, hay una relación uno a uno entre la intensidad del potencial  $V_0$  y la longitud de dispersión  $\alpha$ . Se consideró el caso en el cual a lo más se admite la presencia de un estado ligado en el potencial y encontramos el estado base de la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos, por medio de un cálculo Monte Carlo, para diferentes valores de la longitud de dispersión  $\alpha$  y alcances del potencial  $r_v \ll r_{ho} \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Por lo que los parámetros con unidades de longitud que definen el sistema son la longitud de dispersión  $\alpha$  y el alcance del potencial  $r_v$ . En este caso la correspondiente relación del virial, Ec. (6.13) es [167]:

$$E = 2E_{tr} - \frac{r_v}{2} \frac{\partial E}{\partial r_v} \Big|_{\alpha=\text{constante}} - \frac{\alpha}{2} \frac{\partial E}{\partial \alpha} \Big|_{r_v=\text{constante}}, \quad (6.14)$$

la cual se puede escribir como

$$E = 2E_{tr} - \frac{r_v}{2} \frac{\partial E}{\partial r_v} \Big|_{\alpha=\text{constante}} + \frac{1}{2\alpha} \frac{\partial E}{\partial (1/\alpha)} \Big|_{r_v=\text{constante}}. \quad (6.15)$$

En la región BEC, la energía total  $E$  se puede volver extremadamente grande comparada con la energía total  $E$  del lado BCS, esto es debido a la contribución de la energía de ligadura de las moléculas formadas, lo cual incrementa los errores numéricos en la evaluación de las derivadas de la ecuación (6.15). Para poder aislar estos efectos de dos cuerpos de los efectos de muchos cuerpos, encontramos conveniente tomar en cuenta el comportamiento de la energía de ligadura de la siguiente forma. El problema de dos cuerpos interactuantes en el espacio libre que se explicó en el Capítulo Cuatro tiene una expresión analítica para la longitud de dispersión, Ec. 4.18, la cual es

$$\alpha = -2r_v \left[ \frac{\pi N_0(\zeta)}{2 J_0(\zeta)} - \log(\zeta/2) - C \right], \quad (6.16)$$

donde  $\zeta = (2r_v \sqrt{|V_0|m/\hbar})$ ,  $C = 0.577215664901\dots$  es la constante de Euler y  $J_\nu$  y  $N_\nu$  representan las funciones de Bessel de primer y segundo tipo de orden  $\nu$ , respectivamente. Este problema tiene los siguientes estados ligados, Ec. 4.15:

$$\tilde{\varphi}(r) = \mathcal{N} J_{2r_v \sqrt{|\varepsilon_s^{(r_v)}| m/\hbar}}(y),$$

donde  $\mathcal{N}$  es un factor de normalización y  $y = \zeta e^{-r/2r_v}$ . La condición de frontera en el origen implica que  $J_{x_s}(\zeta) = 0$ , de tal forma que las correspondientes eigenenergías  $\varepsilon_s^{(r_v)}$  cumplen la ecuación

$$2r_v \sqrt{|\varepsilon_s^{(r_v)}| m/\hbar} = x_s. \quad (6.17)$$

De la ecuación anterior se puede notar que  $x_s$  está determinada por  $\zeta$  y por

$$\varepsilon_s^{(r_v)} = -\frac{(\hbar x_s)^2}{4mr_v^2}. \quad (6.18)$$

Además observamos que la ecuación (4.18) se puede ver como una función de  $\zeta$ :

$$\alpha = r_v \eta(\zeta). \quad (6.19)$$

Entonces dado un valor de  $\alpha$  y del alcance del potencial  $r_v$  y usando la Ec. (6.19), el término  $x_0$  se puede escribir de la siguiente forma

$$x_0 = x_0(\zeta) = x_0 \left( \eta^{-1} \left( \frac{\alpha}{r_v} \right) \right) \equiv w \left( \frac{\alpha}{r_v} \right). \quad (6.20)$$

Como consecuencia, la energía de ligadura del estado base  $\varepsilon_0^{(r_v)}$  del sistema de dos partículas interactuante en el espacio libre satisface la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}
r_v \frac{\partial \varepsilon_0^{(r_v)}}{\partial r_v} \Big|_{\alpha=\text{constante}} &= -2\varepsilon_0^{(r_v)} - 2 \frac{\varepsilon_0^{(r_v)} w'(\alpha/r_v)}{x_0} \frac{\alpha}{r_v} \\
&= -2\varepsilon_0^{(r_v)} - \alpha \frac{\partial \varepsilon_0^{(r_v)}}{\partial \alpha} \Big|_{r_v=\text{constante}}.
\end{aligned} \tag{6.21}$$

Utilizando la definición de la energía por partícula  $\tilde{E}$  descrita en la sección anterior:

$$\tilde{E} = \begin{cases} \frac{E}{2N} & \text{si } \alpha < 0, \\ \frac{E}{2N} - \frac{\varepsilon_0^{(r_v)}}{2} & \text{si } \alpha > 0, \end{cases} \tag{6.22}$$

y que el potencial de confinamiento es:

$$\langle m\omega^2 R^2 \rangle = \left\langle \frac{\sum_i^N m\omega(|r_{\uparrow i}|^2 + |r_{\downarrow i}|^2)}{2N} \right\rangle, \tag{6.23}$$

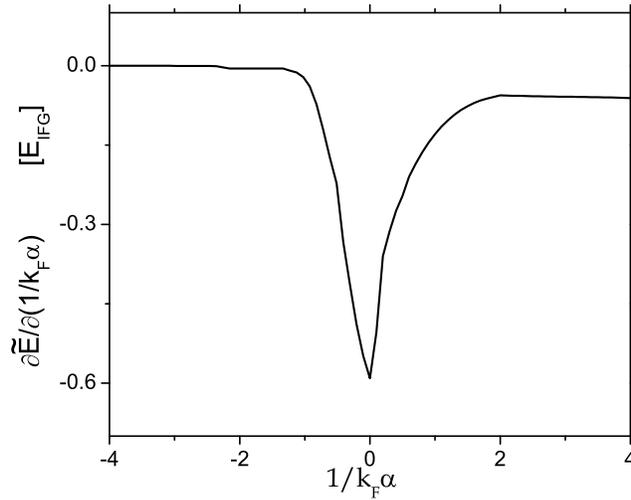
entonces la relación del virial, Ec. (6.15) es:

$$\langle m\omega^2 R^2 \rangle = \tilde{E} + \frac{r_v}{2} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial r_v} \Big|_{\alpha=\text{constante}} - \frac{1}{2\alpha} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial (1/\alpha)} \Big|_{r_v=\text{constante}}. \tag{6.24}$$

La ecuación anterior es más fácil de verificar de forma numérica que la Ec. (6.15) para el caso de el potencial exponencial de corto alcance. Para otras formas del potencial de interacción, siempre y cuando sea de corto alcance, se puede hacer un análisis dimensional para obtener expresiones análogas a la Ec. (6.20).

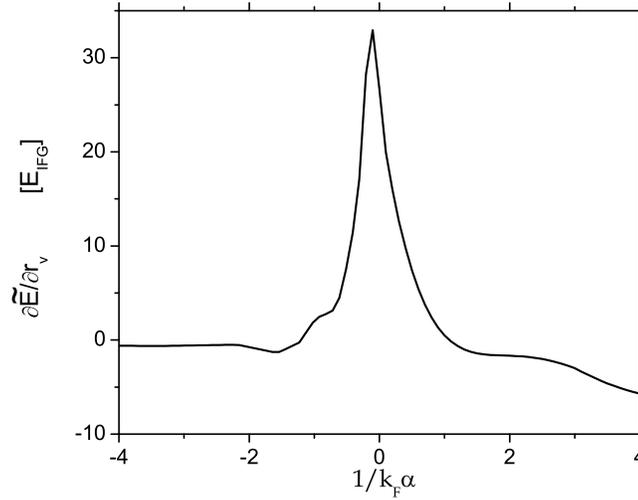
### 6.2.3 Resultados numéricos.

Para obtener las relaciones del virial, Ec. (6.15), se utilizaron las curvas de energía utilizadas en la Sección Uno de este Capítulo, en particular la correspondiente a  $r_v = 0.0025$ , Figura 6.1. En esa gráfica se observa que las curvas de la energía por partícula  $\tilde{E}$  como función de la longitud de dispersión, para un alcance dado y en el rango de una longitud de dispersión dada, muestran una estructura suave, lo cual permite realizar una interpolación numérica o incluso un ajuste con una curva analítica. Estas interpolaciones fueron usadas para calcular numéricamente la derivada respecto al inverso de la longitud de dispersión. Para poder evaluar la derivada respecto al alcance del potencial se emplearon los resultados que originaron la Figura 6.4, donde se muestra la curva de energía como función de  $1/k_F\alpha$  para diferentes valores del alcance del potencial; al fijar un valor de  $\alpha$  se calcula la derivada numérica respecto al alcance del potencial. Los resultados de estas derivadas se muestran en las Figuras 6.6 y 6.7. Cabe destacar que para todos los valores del alcance del potencial explorados, ambas derivadas  $\partial \tilde{E} / \partial (1/k_F\alpha)$  y  $\partial \tilde{E} / \partial r_v$ , presentan valores extremos en la región de unitariedad.



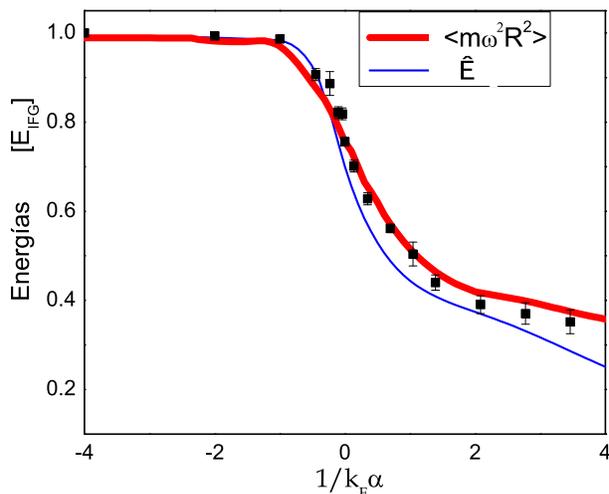
**Figura 6.6:** Derivada parcial de la energía por partícula  $\tilde{E}$  respecto al inverso de la longitud de dispersión para un alcance del potencial  $r_v = 0.0025$ . Las unidades de la energía  $\tilde{E}$  corresponden a la energía total por partícula del gas de Fermi no interactuante  $E_{IFG}$ .

En la Figura 6.8 se reporta una comparación entre la curva de energía predicha por la relación del virial, Ec. (6.24), y los valores obtenidos para los radios, evaluados directamente de la simulación Monte-Carlo, utilizando la correspondiente función de prueba variacional para cada región. En estos resultados el alcance del potencial empleado es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Observamos que tanto los resultados de la energía variacionales como los obtenidos con las relaciones del virial son compatibles, pues coinciden muy bien en todo el cruce. El ancho de la curva continua incluye la barra de error numérica asociada. La barra de error de los resultados de la energía de confinamiento, representada por los puntos de la Figura 6.8, indica el rango de los valores de la energía variacional mínima para diferentes valores de los parámetros variacionales  $\lambda_{EL}$  y  $\omega'$  para varios valores de la semilla en la simulación Monte-Carlo. De hecho, la coincidencia entre los resultados de la energía de confinamiento evaluada directamente de los cálculos Monte-Carlo y aquella evaluada a partir de las relaciones del virial puede ser usada como un criterio adicional para seleccionar esos parámetros. Como una referencia, en la Figura 6.8 se muestra la curva de energía de muchos cuerpos  $\tilde{E}(1/k_F \alpha)$  representada por la línea sólida delgada. El cruce entre las curvas del virial  $\langle m\omega R^2 \rangle$  y la energía total  $\tilde{E}$  no ocurre en unitariedad debido a efectos de rango finito.



**Figura 6.7:** Derivada parcial de la energía por partícula  $\tilde{E}$  respecto al alcance del potencial  $r_v$  como función de  $1/k_F \alpha$ . Las unidades de la energía  $\tilde{E}$  corresponden a la energía total por partícula del gas de Fermi no interactuante  $E_{IFG}$ .

Por último cabe mencionar que en el análisis del teorema del virial que reportamos, se utilizó un muestreo estadístico que consistió en 30000 pasos con 6000 de termalización y se hicieron del orden de 5 o 6 corridas por cada valor de la longitud de dispersión, obteniendo en general resultados compatibles en todas las regiones. Aún así hay un punto en particular en la región BCS, que corresponde a aquél donde la longitud de dispersión  $\alpha$  tiene el valor de -0.515082, que equivale a  $1/k_F \alpha = -0.445397$ , donde el cálculo de la energía es difícil y para el cual se hicieron muchas simulaciones y aún así, no se logró obtener un ajuste adecuado a las relaciones del virial. Salvo ese valor en todos los demás puntos estudiados las relaciones del virial se cumplen para un potencial de rango finito. Notamos que para un gas de Fermi confinado es necesario considerar el alcance del potencial para calcular las relaciones del virial fuera de unitariedad.

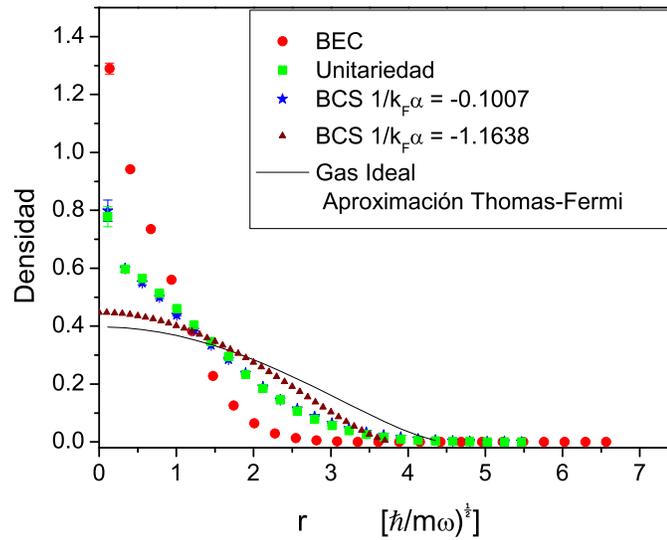


**Figura 6.8:** Curvas suavizadas para la energía por partícula  $\tilde{E}$  y el valor medio del doble de la energía de confinamiento  $\langle m\omega^2 R^2 \rangle$ , calculada mediante la relación del virial, Ec. (6.24). Los puntos representan el valor de la energía de confinamiento obtenida directamente de las funciones de onda prueba. Las unidades de la energía  $\tilde{E}$  corresponden a la energía total por partícula del gas de Fermi no interactuante  $E_{IFG}$ .

## 6.3 Propiedades del Gas.

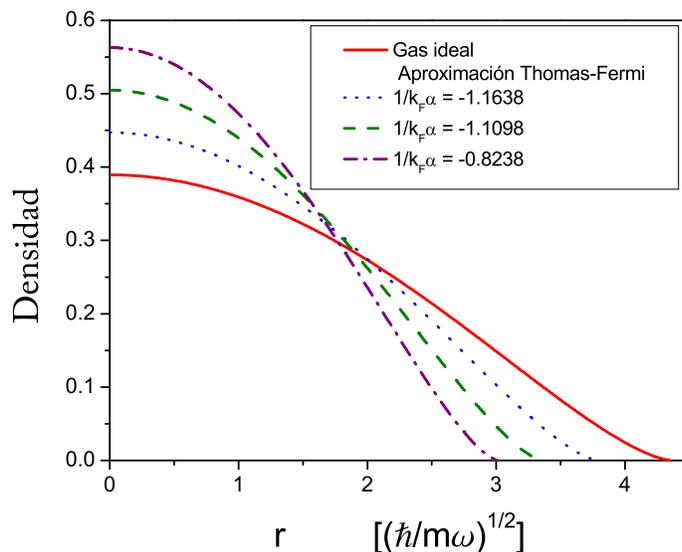
### 6.3.1 Densidades y correlaciones.

Debido a que los gases de Fermi están confinados e interactúan por medio de un potencial de interacción, que modelamos como un potencial de pares de partículas, se pueden estudiar propiedades del gas que reflejan su naturaleza cuántica intrínseca así como el comportamiento colectivo de las partículas. Estas propiedades se reflejan en las funciones de correlación de una sola partícula y de dos partículas. En esta sección se muestran estas funciones de correlación para  $2N = 330$  partículas, en las regiones BEC ( $\alpha > 0$ ), BCS ( $\alpha < 0$ ) y el límite de unitariedad ( $\alpha \rightarrow \infty$ ). Los cálculos son a temperatura cero.



**Figura 6.9:** Perfil de densidad para  $N = 165$  partículas de cada especie. La curva sólida corresponde al gas ideal en la aproximación de Thomas-Fermi, los círculos a la región BEC donde se utilizó  $1/k_F\alpha = 2.13346$ , las estrellas y los triángulos a la región BCS donde se utilizó un valor diferente de la longitud de dispersión, las estrellas corresponden a la región del cruce con  $1/k_F\alpha = -0.10071$ , mientras que los triángulos corresponden a la región BCS con  $1/k_F\alpha = -1.1638$  y los cuadrados a unitariedad. El alcance del potencial utilizado para estos cálculos es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

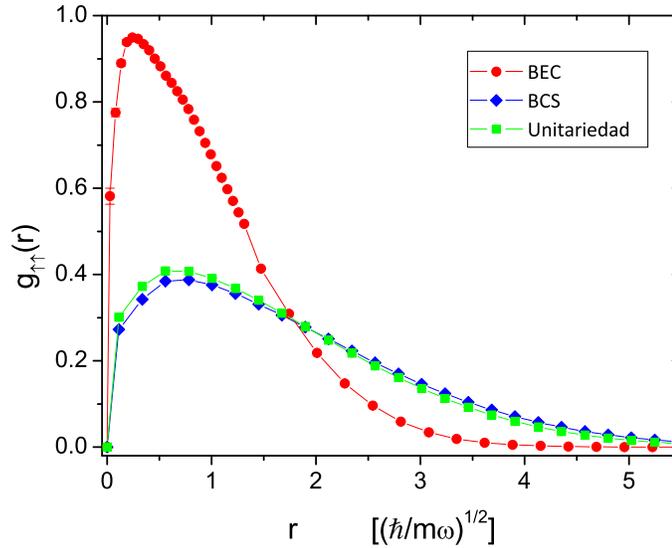
La función de correlación de una sola partícula,  $\rho(r)$ , es el perfil de densidad como función de la distancia al centro de la trampa armónica [57]. En las Figuras 6.9 y 6.10 se ilustran los perfiles de densidad para un gas de Fermi interactuante y confinado. En la Figura 6.9, se muestran los perfiles para la región BEC (círculos), BCS cercana a unitariedad (estrellas), BCS fuera de la región del cruce (triángulos), y en unitariedad (cuadrados), donde se observa que la densidad de partículas disminuye hasta que se hace cero alrededor del radio de Fermi, lo cual refleja el efecto de la trampa armónica [43]. Además de estos perfiles de densidad, en la Figura 6.9 se muestra el perfil de densidad para un gas ideal en la aproximación de Thomas-Fermi [43], representado por la línea sólida; en este caso la distribución se concentra en el centro de la trampa. Para la región BCS, se ilustran dos perfiles de densidad, uno corresponde a la región del cruce cercana a unitariedad con un valor de  $1/k_F\alpha = -0.10071$ , y está representado por las estrellas mientras que los triángulos corresponden a un valor de  $1/k_F\alpha = -1.1638$ , que pertenece a la región BCS fuera del cruce. La forma del perfil de densidad en esta región, es similar a aquél correspondiente al gas ideal pero con diferente radio medio. La densidad se incrementa en el centro mientras que disminuye conforme se va a las orillas de la trampa. Estas desviaciones pueden ser atribuidas al valor óptimo del parámetro variacional que



**Figura 6.10:** Perfil de densidad para  $N = 165$  partículas de cada especie, en la región BCS. La curva sólida corresponde al gas ideal en la aproximación de Thomas-Fermi, la línea punteada corresponde a  $1/k_F\alpha = -1.1638$ , la línea en segmentos corresponde a  $1/k_F\alpha = -1.1098$  y la línea segmento-punto-segmento corresponde a  $1/k_F\alpha = 0.8238$ . El alcance del potencial utilizado para estos cálculos es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

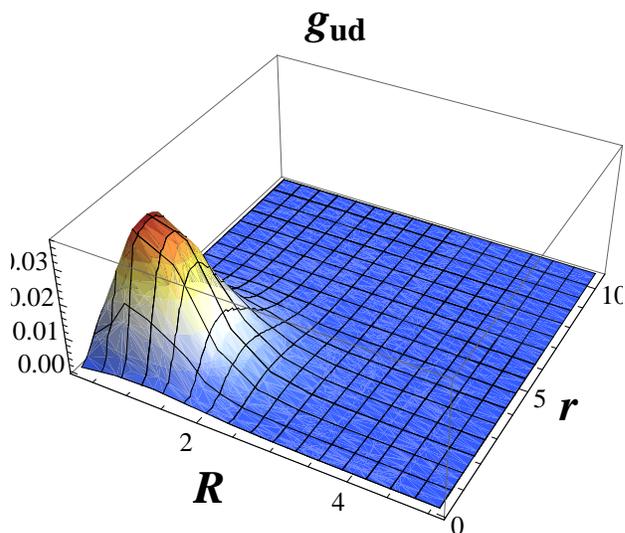
captura la interacción y los efectos de correlación en el sistema de muchos cuerpos. Este tipo de forma prevalece hasta el límite de unitariedad; en la figura esta región corresponde a los cuadrados y como se observa el perfil de densidad tiene una forma similar al de la región BCS. La región BEC está representada por los círculos que se muestran en la figura 6.9, donde se observa que la mayoría de los pares de átomos están localizados cerca del origen, lo cual es signo de la condensación de las moléculas, en este caso se utilizó  $1/k_F\alpha = 2.13346$ . En la Figura 6.10 se muestran los perfiles de densidad para la región BCS, para diferentes valores de la longitud de dispersión fuera de la región del cruce. La función de prueba utilizada corresponde a la Ec. (5.103). En este caso el perfil de densidad está determinado por la frecuencia efectiva  $\omega'$  ya que las funciones de Jastrow prácticamente no afectan la curva de la densidad. Los valores de  $1/k_F\alpha$  ilustrados en la figura 6.10, junto con el respectivo valor del parámetro variacional  $\omega'$  son: para  $1/k_F\alpha = 0.8238$ ,  $\omega' = 1.3183966$ ;  $1/k_F\alpha = 1.1098$ ,  $\omega' = 1.6804344$  y para  $1/k_F\alpha = 1.1638$ ,  $\omega' = 1.8742357$ . Estos perfiles son similares a los perfiles del gas ideal. Los perfiles de densidad tanto de la Figura 6.9 como de la Figura 6.10 están normalizados,  $\int \rho(r)dr = 1$ .

Para poder exhibir el comportamiento cuántico de los átomos fermiónicos, se calcula la función de correlación de pares de partículas en el mismo estado hiperfino  $g_{\uparrow\uparrow}(r)$ ; la cual se

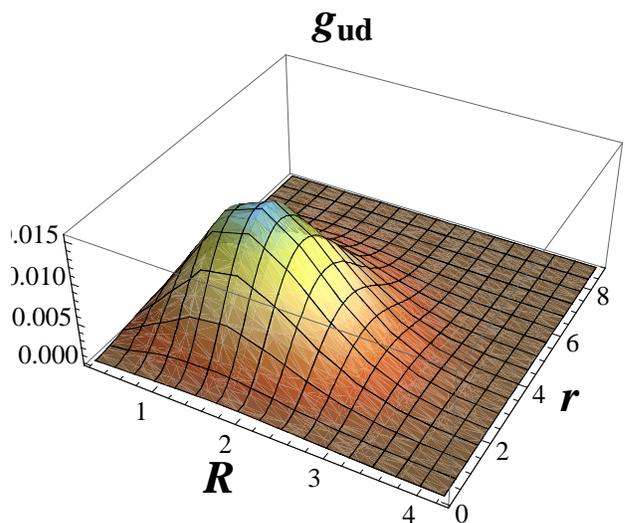


**Figura 6.11:** Funciones de correlación normalizadas  $g_{\uparrow\uparrow}(r)$  para partículas en el mismo estado hiperfino como función de la distancia relativa. Los círculos corresponden a la región BEC para  $1/k_F\alpha = 2.13346$ , los rombos a la región BCS donde  $1/k_F\alpha = -0.10071$  y los cuadrados a unitariedad. Las distancias están medidas en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ , el valor del alcance del potencial utilizado es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

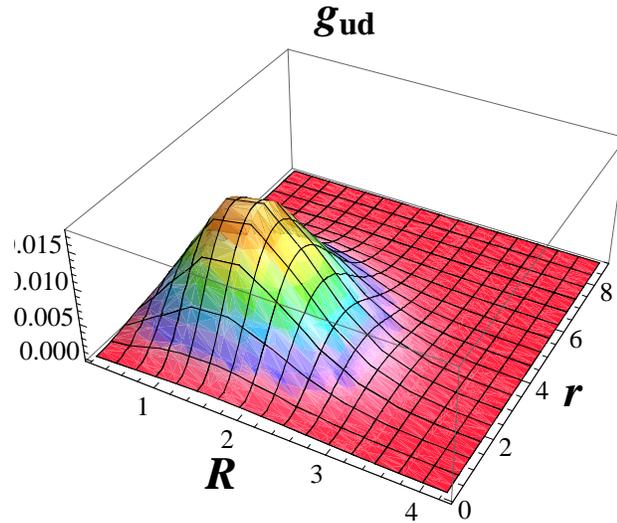
muestra en la Figura 6.11 para el caso de unitariedad representado por cuadrados, la región BCS cercana a unitariedad representada por rombos donde se utilizó  $1/k_F\alpha = -0.10071$ . Para la región BEC representada por círculos en este caso  $1/k_F\alpha = 2.13346$ ; el alcance del potencial utilizado es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Los cálculos para obtener esta función de correlación involucran encontrar la fracción de átomos en el mismo estado hiperfino dentro de una distancia relativa  $(r, r + dr)$ , la cual es generada en la simulación Monte Carlo, independientemente de la posición del centro de masa de la partículas. La función de onda mostrada en la Figura 6.11 está normalizada, para lo cual se dividió entre  $N(N-1)/2$ , pues se considera la forma en que se cuentan los átomos. Debido a que las partículas estudiadas son fermiones, el bloqueo de Pauli se observa a través de la ausencia de dos átomos muy próximos entre sí. En todas las regiones, la función de correlación de dos partículas en el mismo estado de espín decrece para distancias relativamente grandes como consecuencia de la presencia de la trampa armónica. En el caso de la región BEC, cabe mencionar que los cálculos para esta función de correlación requieren que se exploren con mucho cuidado las distancias muy cortas  $r \ll 1$ .



**Figura 6.12:** Función de correlación  $g_{ud}(r,R)$  para partículas en diferentes estados hiperfinos como función de la distancia relativa y de la posición del centro de masa para la región BEC, se utilizó el valor de  $1/k_F\alpha = 2.13346$ , para un alcance del potencial de  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Las distancias están medidas en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

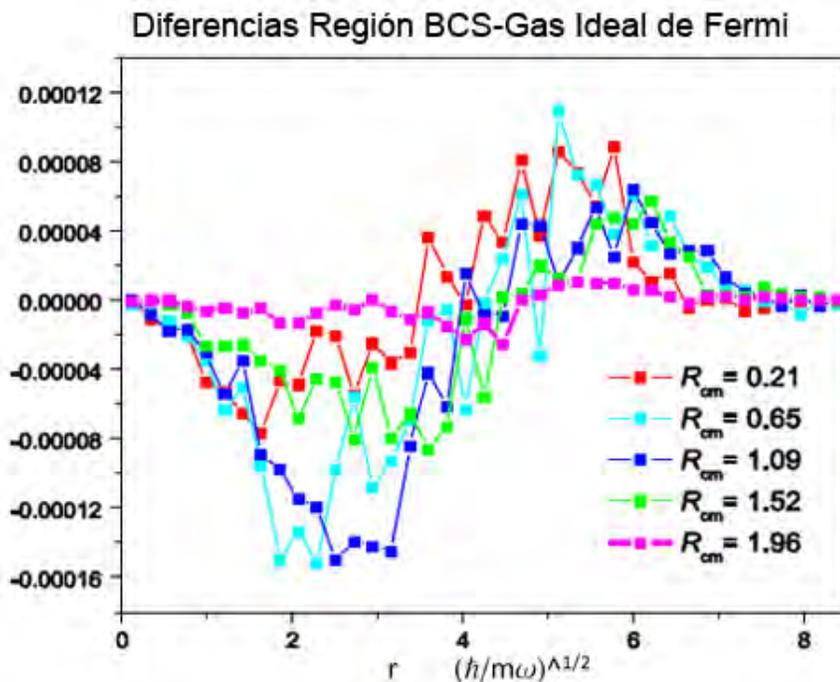


**Figura 6.13:** Función de correlación  $g_{ud}(r,R)$  para partículas en diferentes estados hiperfinos como función de la distancia relativa y de la posición del centro de masa para la región BCS. Se utilizó el valor de  $1/k_F\alpha = -0.10071$ , para un alcance del potencial de  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Las distancias están medidas en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .



**Figura 6.14:** Función de correlación  $g_{ud}(r, R)$  para partículas en diferentes estados hiperfinos como función de la distancia relativa y de la posición del centro de masa para unitariedad,  $1/k_F\alpha = 0$ . El valor del alcance del potencial es  $r_v = 0.0025\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Las distancias están medidas en unidades de  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

En las Figuras 6.12, 6.13 y 6.14 se ilustran las funciones de correlación de dos partículas en diferentes estados hiperfinos,  $g_{ud}(r, R)$ , estas funciones se evaluaron al encontrar la fracción de átomos en diferentes estados hiperfinos dentro de una distancia relativa ( $r, r + dr$ ), para diferentes valores de la distancia del centro de masa  $R$ . En la Figura 6.12, se muestra la función de correlación normalizada  $g_{ud}(r, R)$  para la región BEC donde  $1/k_F\alpha = 2.13346$ . Esta función de onda se normalizó dividiendo entre  $N^2$ . La formación de moléculas se manifiesta por el incremento de las correlaciones para distancias muy cortas,  $r_{i,j} \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$ , mientras que los efectos de la condensación molecular se reflejan porque la probabilidad de encontrar pares de partículas separadas por distancias relativas del orden de  $r_{i,j} \sim \sqrt{\hbar/m\omega}$  aumenta. Como se espera la mayor parte de las moléculas se forman cerca del centro de la trampa. En la Figura 6.13 se muestra la función de correlación normalizada  $g_{ud}(r, R)$  para el caso BCS donde  $1/k_F\alpha = -0.10071 \sqrt{\hbar/m\omega}$ ; mientras que en la Figura 6.14 se ilustra la función de correlación  $g_{ud}(r, R)$  para unitariedad, el alcance del potencial utilizado es  $r_v = 0.0025$ . La Figura 6.13 para el caso BCS se parece a la de unitariedad, Figura 6.14, en gran medida por el punto que se escogió para ilustrar la región BCS, el cual es muy cercano a unitariedad. En la región BCS, sin considerar la región del cruce, las funciones de correlación de dos partículas en dos diferentes estados hiperfinos resultan de dos efectos, el dado por la frecuencia efectiva  $\omega'$  y el de las funciones de Jastrow, las cuales son adecuadas para describir las correlaciones de largo alcance. En la Figura 6.15 se ilustran los efectos que induce una función de onda tipo Jastrow Slater en las correlaciones.



**Figura 6.15:** Efectos de la función de Jastrow ilustrados por medio de la diferencias de la función de Correlación  $g_{ud}(r,R)$  para partículas en diferentes estados hiperfinos entre la región BCS donde  $1/k_F\alpha = -0.22418$  y el Gas Ideal de Fermi, como función de la distancia relativa y de la posición del centro de masa.

### 6.3.2 Gas de Fermi en el límite de unitariedad

En la región del cruce BEC-BEC, que corresponde a  $k_F|\alpha| \gg 1$ , hay una zona donde la longitud de dispersión diverge, que se conoce como *límite de unitariedad*. Esta región es particularmente interesante pues se considera que, independientemente del potencial atómico del gas, este presenta propiedades universales [25]. Para poder describir al sistema, en unitariedad, se hace una suposición conocida como la *Hipótesis de Universalidad*: la única escala de longitud dominante en la unitariedad, para el estado base es la distancia entre las partículas  $n^{1/3}$ , donde  $n$  es la densidad del gas. La idea de esta hipótesis es que considerando que las únicas escalas de longitud relevantes que se utilizan para describir los átomos ultrafríos son la longitud de dispersión  $\alpha$  y la distancia entre partículas  $n^{1/3}$ , y debido a que en la resonancia la longitud de dispersión ya no se puede considerar más como una escala de longitud puesto que diverge, sólo queda como escala relevante  $n^{1/3}$ . Las consecuencias de esta hipótesis de universalidad, son que las variables termodinámicas se pueden escribir de forma universal, y van a depender de constantes universales [25]. Por ejemplo, en un gas de Fermi el ancho medio cuadrado de la nube varía linealmente con la energía total, y la energía de interacción cerca de la resonancia de Feshbach es proporcional a la energía de Fermi. Mientras que, en un superfluido fermiónico la temperatura de

transición  $T_c$  se escala con la temperatura de Fermi, mediante otra constante universal  $\gamma$  mediante la siguiente relación  $T_c = \gamma T_F$ .

A partir de la hipótesis de unitariedad se han podido realizar estudios sobre la termodinámica de los gases cuánticos en el límite de unitariedad. Los resultados obtenidos son: (i) En el régimen de unitariedad, la forma del potencial termodinámico depende solamente de la fase termodinámica, ya sea la región normal o la región superfluida [25]. (ii) Las propiedades de un gas degenerado de Fermi cerca de la resonancia están caracterizadas por constantes universales. (iii) Utilizando que la termodinámica (potenciales termodinámicos) es universal, se puede determinar los perfiles de densidad de un superfluido fermiónico cerca de la resonancia [25, 168].

A temperatura cero, las propiedades del gas de Fermi unitario están caracterizadas por un parámetro que relaciona la energía por partícula del gas de Fermi interactuante  $E$  y la energía por partícula del gas de Fermi no interactuante  $E_{IFG}$ :

$$E = \xi E_{IFG}. \quad (6.25)$$

$\xi$  es una constante universal conocida como parámetro de Bertsch. El valor de este parámetro se puede determinar de forma teórica o experimentalmente. Los trabajos donde se obtiene el valor teórico de  $\xi$  se dividen en dos rubros, aquéllos que consideran el gas de Fermi interactuante en el caso homogéneo [28, 51–53, 60, 66, 169] y los que lo estudian tomando en cuenta el potencial de confinamiento [56–58, 62, 151, 152, 167]. A continuación se utilizará la notación  $\xi_{hom}$  en el caso que el parámetro universal referido corresponda al del caso homogéneo mientras que  $\xi_{trap}$  denotará el parámetro del gas interactuante y confinado.

Experimentalmente, lo que se mide es la constante  $\beta$  conocida como parámetro universal. Este parámetro se relaciona con  $\xi_{hom}$  o  $\xi_{trap}$  de la siguiente forma:

⊗ Para el caso homogéneo la relación entre  $\xi_{hom}$  y  $\beta$  es

$$\beta = \xi_{hom} - 1, \quad (6.26)$$

siendo la relación entre la energía del gas de Fermi interactuante  $E$  y la del no interactuante:

$$E = (1 + \beta)E_{IFG}. \quad (6.27)$$

⊗ En el caso de un gas de Fermi interactuante y confinado armónicamente la relación entre  $\xi$  y  $\beta$  es diferente a la dada por la ecuación (6.28), pues en una trampa el potencial químico  $\mu_{trap} \sim R^2$ , se reduce por un factor  $\sqrt{\xi}$ . Esto es debido a que en el centro de la trampa la densidad se incrementa debido a la interacción atractiva, por lo que

$$\beta = \xi_{trap}^2 - 1, \quad (6.28)$$

y en este caso la relación entre la energía del gas de Fermi interactuante y la del no interactuante es :

$$E = \sqrt{1 + \beta} E_{IFG}. \quad (6.29)$$

Cabe mencionar que el parámetro universal  $\beta$  es menor que uno, de hecho  $\beta < 0$  porque la interacción atractiva lleva a que el potencial químico en unitariedad,  $\mu$ , sea menor al potencial químico del gas no interactuante,  $\mu^0$ , puesto que  $\mu^0 = E_F$ , pero en el caso de unitariedad el potencial se escala con  $\xi$ ,  $\mu = \xi E_F$ . En los experimentos, el parámetro  $\beta$  se obtiene de diferentes formas, por ejemplo, una de ellas consiste en obtener imágenes de absorción *in situ* de la distribución de densidad  $n(\vec{r})$  de la trampa [46], medir el radio del gas interactuante  $\sigma_r$  con el radio no interactuante  $\sigma^0$ , y usando que  $\beta = (\sigma_r/\sigma^0)^4 - 1$  [18,170], midiendo la energía potencial [76] o la energía de interacción [21].

En los últimos años han habido muchos trabajos donde se ha calculado los valores de los parámetros  $\beta$ ,  $\xi_{hom}$  o  $\xi_{trap}$ . En la Tabla 6.4, se muestran los resultados experimentales para estos parámetros, mientras que en la Tabla 6.5 se muestran los resultados teóricos, tanto en el caso homogéneo como en el caso confinado. En esos cálculos el número de partículas varía desde  $2N = 2$  partículas hasta  $2N = 90$  partículas. Ahí se reporta el método utilizado para obtener el valor del parámetro universal, se presentan sólo las siglas del método que corresponden a: LDA: Local Density Aproximation, TF: Thomas-Fermi, FN-GFMC: Fixed Node- Green's function Monte Carlo, FN-DMC: Fixed-Node Diffusion Monte Carlo, y GFMC: Green's function Monte Carlo technique. Además se utilizó MC para denotar Monte-Carlo.

Artículos Experimentales $\beta$		
Referencia	$\beta$	$\xi$
PRA <b>68</b> 011401(R) (2003)	-0.26(7)	0.8602
PRL <b>91</b> 020402 (2003)	-0.3	0.837
PRL <b>92</b> 120401 (2004)	$-0.68^{+0.13}_{-0.10}$	0.5657
PRL <b>93</b> 050401 (2004)	$-0.64 \pm 0.15$	0.6
Science <b>307</b> 1296 (2005)	-0.49(4)	0.7141
Science <b>311</b> 503 (2006)	$-0.54 \pm 0.05$	$\xi = 0.6782$
PRL <b>97</b> 220406 (2006)	$-0.54^{+0.05}_{-0.12}$	$\xi = 0.6782$
arXiv:cond-mat /0701181v1	-0.59 (15)	$\xi = \sqrt{1 + \beta}$

**Tabla 6.4:** Valores experimentales para los parámetros  $\beta$  y  $\xi$ .

<b>Gas de Fermi interactuante. (Caso Homogéneo)</b>			
Referencia	Método	$\beta$	$\xi_{hom}$
PRC <b>60</b> 054311 (1999)	Aproximación de Padé	-0.674, -0.432	0.326, 0.568
PRA <b>63</b> 043606 (2001)	Aproximación de Padé	-0.67	0.33
PRL <b>91</b> , 050401 (2003)	FN-GFMC	-0.56(1)	0.44 (1)
PRA <b>70</b> 043602 (2004)	FN-GFMC	-0.56(1)	0.44(2)
PRL <b>93</b> 200404 (2004)	FN-DMC	-0.58	0.42(1)
PRA <b>70</b> 053602 (2004)	Análisis a $T \neq 0$ . Calculan $\Omega$	-0.3	0.7
PRL <b>95</b> 060401 (2005)	Campo Medio y QMC	-0.58	0.42(1)
Europhys. Lett. <b>74</b> 574 (2006)	Funciones de Green y diagramas	-0.599	0.401
PRL <b>97</b> 050403 (2006)	Expansión 4 – $\epsilon$ dimensiones	-0.525	0.475
PRA <b>75</b> 043605 (2007)	Expansión $\epsilon$	-0.7, -0.633 -0.641, 0.624	0.3, 0.367, 0.359, 0.376
PRA <b>77</b> 051602(R) (2008)		-0.56	0.44(2)
PRC <b>77</b> 032801(R) (2008)	FN-QMC	-0.6	0.40(1)
PRC <b>78</b> 024001 (2008)	Monte-Carlo híbrido	-0.708 -0.671	0.292(12) 0.329(5)
<b>Gas de Fermi confinado en una trampa e interactuante.</b>			
Referencia	Método	$\beta$	$\xi_{trap}$
PRL <b>89</b> 250402 (2002)	Aproximaciones de LDA y TF	-0.61	0.624
PRL <b>93</b> 100404 (2004)	Usan la aproximación de LDA	-0.545	0.6745
PRA <b>76</b> 021603(R) (2007)	GFMC	$\leq -0.5$	$\leq 0.707$
PRA <b>76</b> 053613 (2007)	FN-DMC	$\leq -0.535$	$\leq 0.6819$
PRA <b>76</b> 011604 (R) (2007)	Método Variacional MC	$\leq -0.50(2)$	$\leq 0.707$
PRA <b>77</b> 043619 (2008)	FN-DMC	$\leq -0.533$	$\leq 0.683$
ArXiv:0803.0559	Método Variacional MC	$\leq -0.51(1)$	$\leq 0.7$
JPB <b>43</b> 065301 (2010)	Método Variacional MC	$\leq -0.624(8)$	$\leq 0.613(8)$

**Tabla 6.5:** Valores teóricos para los parámetro  $\beta$  y  $\xi$ ;  $\xi_{hom}$  denota el parámetro para el caso interactuante y homogéneo y  $\xi_{trap}$  para el caso interactuante y confinado.

Para el sistema en estudio del presente trabajo, un gas de Fermi interactuante por medio de un potencial exponencial de alcance  $r_v$  y confinado por medio de una trampa armónica, se realizaron simulaciones exhaustivas de la energía para el análisis del límite de unitariedad. Se hicieron cálculos Monte Carlo en el caso de  $2N = 330$  partículas para diferentes valores del alcance del potencial, considerando valores pequeños,  $r_v/\sqrt{\hbar/m\omega} = 0.0005, 0.001, 0.0015, 0.002, 0.0025, 0.00375, 0.005, 0.01$  y  $0.015$ . Los cálculos se hicieron con diferente estadística variando desde 10000 pasos hasta 80000, para diferentes valores de la semilla. La función de onda que se utilizó es la dada por la Ec. (5.121). Se obtuvieron los valores de la energía por partícula  $E$ , en este límite  $E = \tilde{E}$ . El parámetro  $\xi_{trap}$  se calculó mediante la relación

$$\xi_{trap} = \frac{E}{E_{IFG}}.$$

En la Tabla 6.6 se indican los valores promedio que obtuvimos, así como el error asociado a cada uno, el cual indica el rango de los diferentes valores obtenidos.

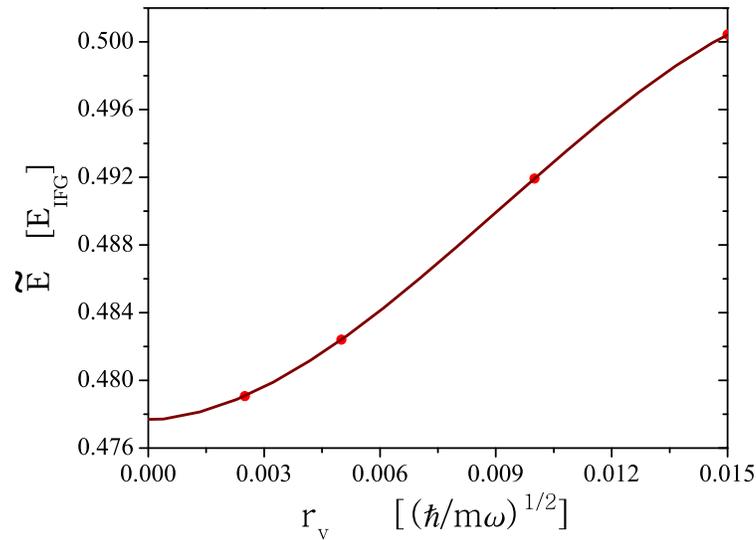
Resultados para $\xi_{trap}$ y $\beta$ en unitariedad.		
$r_v$	$\xi_{trap} = \frac{E}{E_{IFG}}$	$\beta = \xi_{trap}^2 - 1$
0.0005	$0.52504 \pm 0.01749$	-0.72433
0.001	$0.57395 \pm 0.01875$	$-0.67058 \pm 0.00918$
0.0015	$0.64727 \pm 0.01945$	$-0.58104 \pm 0.01259$
0.002	$0.66985 \pm 0.02469$	$-0.55130 \pm 0.01654$
0.0025	$0.7 \pm 0.00744$	$-0.51000 \pm 0.00521$
0.00375	$0.75113 \pm 0.01141$	$-0.43580 \pm 0.00857$
0.005	$0.79178 \pm 0.00296$	$-0.37308 \pm 0.00234$
0.015	$0.82931 \pm 0.00267$	$-0.31224 \pm 0.00221$

**Tabla 6.6:** Valores obtenidos en este trabajo para  $\xi_{trap}$  y  $\beta$  en el caso de  $2N = 330$  partículas. Los resultados se presentan para diferentes valores del alcance del potencial de interacción  $r_v$ .

Para el caso de los resultados mostrados para  $2N = 330$  partículas cabe mencionar que se debe explorar cuidadosamente la región del parámetro variacional  $\lambda_{EL}$ . El tiempo de cómputo para cada uno de estos cálculos aumenta dependiendo de la estadística y del número de partículas.

## 6.4 Límite de rango cero.

Una vez que se obtuvo la energía por partícula  $\tilde{E}$ , de una mezcla balanceada de fermiones en dos diferentes estados de espín que interaccionan por medio de un potencial exponencial de corto alcance,  $r_v$ , como función de la longitud de dispersión para diferentes valores del



**Figura 6.16:** Valores de la energía  $\tilde{E}$  para  $1/k_F\alpha = 0.8$  como función del alcance. Se muestra el ajuste de un polinomio de grado tres con el que se obtiene el valor de la energía cuando el alcance del potencial tiende a cero.

alcance del potencial, se puede estudiar también el límite cuando el alcance del potencial tiende a cero. En este caso se fija un valor de la longitud de dispersión  $\alpha$ , y con los valores obtenidos de la energía para diferentes valores del alcance del potencial se hace una extrapolación del valor de la energía cuando  $r_v \rightarrow 0$ . Por ejemplo, en la Figura 6.16 se muestra el ajuste para el caso donde  $1/k_F\alpha = 0.8$ . Se grafican los valores de la energía como función del alcance del potencial, y se hace un ajuste con un polinomio, en este caso es uno de grado tres. El valor obtenido en el límite que  $r_v \rightarrow 0$  es  $\tilde{E} = 0.478$ . Se procede de esta forma para diferentes valores de  $1/k_F\alpha$ . En la Figura 6.17 se muestran los resultados obtenidos para la energía como función de  $1/k_F\alpha$ , en el límite que el alcance del potencial tiende a cero. También se ilustran las diferentes curvas de energía que se usaron para obtener los resultados. La línea sólida corresponde al límite de rango cero.

En la sección anterior se presentaron los resultados del parámetro universal para el límite de unitariedad para diferentes valores del alcance del potencial para  $2N = 330$  partículas. Para poder obtener una predicción del parámetro  $\xi_{trap}$  o  $\beta$  en el límite en el cual el alcance del potencial tienda a cero, se hace una gráfica con los datos mostrados en la Tabla 6.6. En la Figura 6.18 se muestran los datos de la energía en unidades del gas de Fermi no interactuante, es decir, se muestra  $\xi_{trap}$  como función del alcance del potencial. Para estos datos, se hace un ajuste con una función logística, obteniendo así la predicción

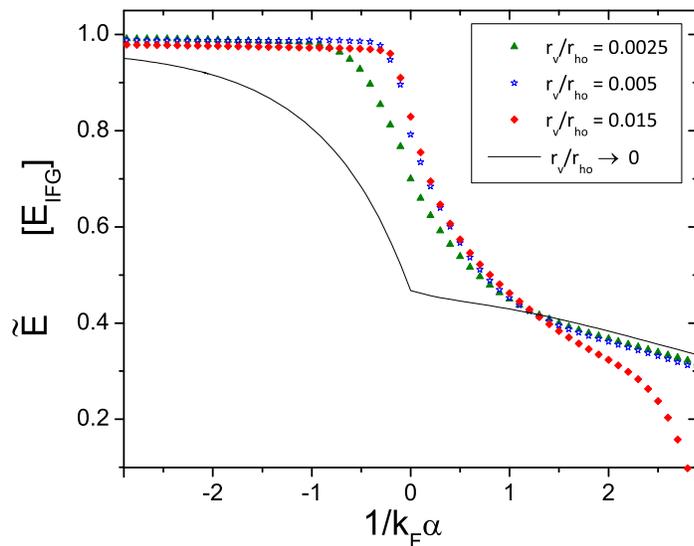


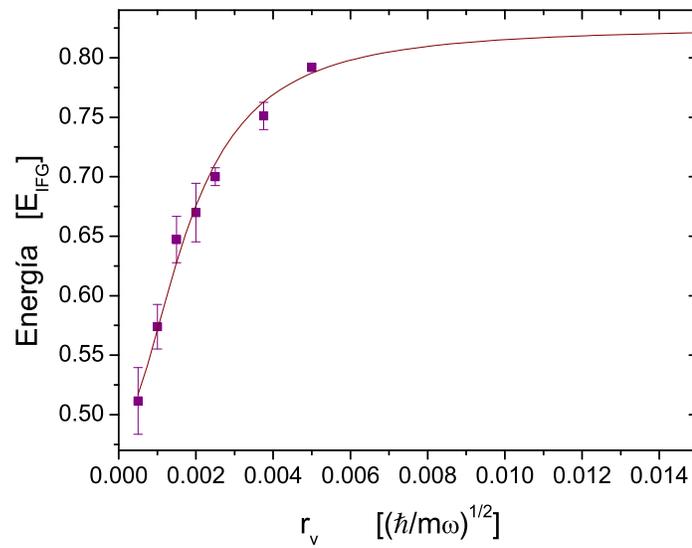
Figura 6.17: Límite de rango cero.

mostrada en la Tabla 6.7, en el límite donde el alcance del potencial  $r_v$  tiende a cero.

Resultados para $\xi_{trap}$ y $\beta$ $r_v \rightarrow 0$ .	
$\xi_{trap} = \frac{E}{E_{IFG}}$	$\beta$
$0.49363 \pm 0.01287$	$-0.75633$

Tabla 6.7: Valores obtenidos en este trabajo para  $\xi_{trap}$  y  $\beta$  en el caso de  $2N = 330$  partículas, en el límite  $r_v \rightarrow 0$ .

Resultados similares se pueden obtener para diferente número de partículas.



**Figura 6.18:** Energía  $E$  como función del alcance del potencial  $r_v$ , en el límite de unitariedad,  $1/k_F\alpha = 0$ , para  $2N = 330$  partículas. Las unidades de la energía son  $E_{IFG}$ , la energía por partícula del gas de Fermi no interactuante.



# CAPÍTULO 7

## Conclusiones.

En la presente tesis, se estudió una mezcla balanceada de átomos de Fermi en dos estados hiperfinos, a temperatura cero, acoplados principalmente en el canal de onda- $s$ . Los átomos están confinados por medio de una trampa armónica isotrópica de frecuencia  $\omega$  e interactúan por medio de un potencial de corto alcance atractivo. Este potencial se eligió como exponencial y su intensidad se sintonizó en términos del valor de la longitud de dispersión. En el límite de rango cero los resultados deben ser independientes de la naturaleza del potencial atractivo. Este gas de Fermi se estudió en las regiones BEC, BCS, el cruce BEC-BCS y así como en unitariedad.

Antes de abordar el sistema de muchas partículas, estudiamos el caso de dos partículas confinadas e interactuantes, ecuación (4.25), la cual se resolvió de forma numérica obteniendo las eigenenergías y eigenfunciones para diferentes valores de la longitud de dispersión  $\alpha$  y diferentes valores del alcance del potencial  $r_v$ . Se obtuvo que la energía del estado base para el estado de resonancia cero en el límite en que el alcance del potencial tiende a cero, corresponde a  $0.5 \hbar\omega$ . Se encontraron expresiones analíticas que se ajustan a las eigenfunciones obtenidas de forma numérica, para valores de la longitud de dispersión positivos y negativos, ecuaciones (4.27) y (4.28). Se hizo una comparación con el potencial delta regularizado, para las energías en el límite de rango cero obteniendo que son compatibles, Figura 4.8.

El sistema de muchos cuerpos se resolvió utilizando el método Monte-Carlo variacional. Se propusieron dos tipos de funciones de onda prueba para modelar el sistema de muchos cuerpos, dependiendo de la región a estudiar. Para el límite BCS, se utilizó la función de onda dada por la ecuación (5.114). Cabe mencionar que para esta región en primera instancia se utilizó la función de onda de Jastrow-Slater dada por la ecuación (5.103). Aunque esta función de onda incorpora las correlaciones entre partículas, para valores del alcance del potencial extremadamente cortos, los valores que se obtuvieron y que minimizaban la energía, eran poco cercanos a las cotas superiores de la energía que se

obtienen con las funciones (5.115). Esto es debido a que las funciones de onda de Jastrow-Slater elegidas son apropiadas para potenciales cuyo alcance sea largo (por ejemplo cuarks interactuantes) pero no para los sistemas de interés en esta tesis.

En la región del cruce y en la región BEC se propuso una función de onda del tipo Eagles-Leggett, ecuación (5.121), la cual es un producto antisimetrizado de funciones que describen a pares de partículas en diferentes estados de espín. Para escribir tal función de onda se utilizaron las expresiones analíticas del problema de dos partículas para longitudes de dispersión positivas y negativas, multiplicadas por una función de onda variacional del centro de masa. Se obtuvo una expresión para la acción del hamiltoniano del sistema de muchos cuerpos, ecuación (5.124), sobre la función de onda descrita por la ecuación (5.123), dicha expresión, ecuación (5.129), es apropiada para evaluar el valor medio del hamiltoniano del sistema y nos permitió hacer cálculos para un número grande de partículas  $N$  de cada especie, utilizando el algoritmo Metrópolis.

De la simulación Monte-Carlo se obtuvieron los valores de los parámetros variacionales para cada región, ya sea  $\lambda_{EL}$  u  $\omega'$ , con lo que se tiene descrita la función de onda del estado base del sistema de muchos cuerpos. Se definió  $\tilde{E}$  la energía por partícula para cada región. Los resultados se muestran a través de curvas de energías como las presentadas en las Figuras 5.1, 5.2, 5.3 y 5.4, donde se grafica  $\tilde{E}$  como función del parámetro adimensional  $k_F\alpha$ ,  $k_F$  es el número de onda de Fermi para diferentes valores del alcance del potencial, lo cual permitió no sólo obtener la energía como función de la longitud de dispersión sino también del alcance del potencial. Las simulaciones se desarrollaron para diferente número de partículas, en este trabajo los resultados se presentaron para el caso particular de  $2N = 330$  partículas.

Se obtuvo una expresión para el teorema del virial que nos permitió verificar con razonable precisión numérica que nuestras funciones son eigenfunciones aproximadas del hamiltoniano de muchos cuerpos no sólo en unitariedad sino en todo el cruce, para un potencial que depende de la longitud de dispersión y del alcance del potencial, ecuación (6.24). Para verificar las relaciones del virial fue necesario evaluar las derivadas de la energía por partícula respecto al inverso de la longitud de dispersión y respecto al alcance del potencial. Se encontró que estas derivadas tienen valores extremos en la región de unitariedad. Finalmente se obtiene que es necesario considerar el alcance del potencial además de la longitud de dispersión para obtener las relaciones del virial en el caso de longitudes de dispersión finitas.

Se calcularon las funciones de correlación de una y de dos partículas para el caso de  $2N = 330$  partículas para las regiones BEC, BCS y unitariedad. Se observa que el hecho de que las partículas estén confinadas afecta estas funciones de correlación, las cuales decrecen con la distancia relativa entre partículas cuando ésta es comparable al tamaño de la trampa.

---

En el límite de unitariedad se calculó la energía del sistema interactuante y confinado para diferente número de partículas. Para el caso particular de  $N = 165$  partículas por cada estado hiperfino, se encontró una cota superior al valor del parámetro  $\xi_{trap}$  para diferentes valores del alcance del potencial, los cuales se reportaron en la Tabla 6.6

Se obtuvieron curvas de energía que nos permiten analizar a la energía como función de la longitud de dispersión y del alcance del potencial, lo que permite obtener una predicción en el límite de rango cero para la curva de energía como función de  $1/k_F\alpha$ , Figura 6.14. Para unitariedad se obtuvieron como cota superior los valores límite del parámetro universal  $\xi_{trap} = 0.5084 \pm 0.01107$  que corresponde a  $\beta = -0.74153$ .

Las funciones de onda y el método Monte-Carlo presentado en este trabajo permiten obtener eigenenergías y eigenfunciones del sistema de muchos cuerpos. El número de partículas considerado en este trabajo es un orden de magnitud superior al de cualquier trabajo reportado en la literatura del tema. Con estas funciones se pueden estudiar propiedades del sistema, como las funciones de correlación y el teorema del virial, así como predecir valores para parámetros universales en la región de unitariedad.



## Programa para calcular la longitud de dispersión.

Este programa está basado en el método de fase variable mostrado en la sección 2.1.3 del Capítulo dos. En este caso se muestra el programa que calcula la longitud de dispersión en onda- $s$  para el potencial exponencial,  $V(r) = V_0 e^{-r/r_v} = V_0 e^{-2r/b}$ ,  $r_v = b/2$  es el alcance del potencial. Sin embargo, este programa se puede utilizar para calcular la longitud de dispersión de cualquier potencial de interacción de corto alcance y para cualquier onda parcial.

Se utiliza que la amplitud del potencial depende de un parámetro  $a$  de la siguiente forma:

$$V_0 = (z1/a)^2 \tag{A.1}$$

El signo del potencial atractivo está incluido en la ecuación que se programa para onda- $s$ , la cual es la ecuación 1.51 del Capítulo 1, esta ecuación se muestra a continuación:

$$\delta'_0(r) = -k^{-1}V(r) \sin^2[kr + \delta_0(r)] \tag{A.2}$$

Al resolver la ecuación anterior se obtienen los corrimientos de fase  $\delta_0$ , para calcular la longitud de dispersión se utiliza la ecuación 1.29:

$$\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{l}. \tag{A.3}$$

A continuación se muestra el programa para calcular los corrimientos de fase  $\delta_0$  y por ende la longitud de dispersión.

PROGRAM CALOGERO

```

c  Se definen las variables
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  EXTERNAL F
  DIMENSION Y(1),YP(1)
c  Se definen las variables comunes
  COMMON/ENERGY/ak,V0,b

c  Abre el archivo 3 que corresponde a long_disp.dat
  OPEN (3,FILE='long_disp.dat')

c  Se definen los parámetros
  z1 = 2.40482555769577d0  !Es el primer cero de Bessel
  a = 0.035d0             !Valor del parámetro a de la Ec. (A.1)
  V0 = (z1/a)**2          !Se define el valor de la amplitud
                          !del potencial (Ec. A.1)
  b = 0.3D0              !El doble del alcance del potencial

  WRITE(3,*) b           !Escribe el valor del parámetro b en el archivo 3
  PRINT*, b

  r_0 = 0.1D-6
  Y(1) = 0.0D0          !Condición a la frontera

500  FORMAT (F17.5, A1, F9.7, A5, F15.12, A1, F15.12)

  NSTEP = 10000
  EPSILON= 0.01D0      !Valor de la energía
  AK = DSQRT(EPSILON)
  dr = 0.001D0
  r = r0

  DO I=1,NSTEP
    r_out = r + dr
  RELERR = 1.D-14      !Error relativo
  ABSERR = 1.D-14     !Error absoluto
  IFLAG = 1
  MAXNUM = 10000

c  Llama la subrutina que resuelve la ecuación diferencial. Esta
  llama a su vez a la subrutina F que define la ecuación
  diferencial
  Call DE(F,1,Y,r,r\_out,RELERR,ABSERR,IFLAG,MAXNUM)

```

```

      IF(IFLAG.NE.2) THEN
WRITE(1,*) 'IFLAG=',IFLAG, 'NSTEP=',I,
*          'EPSILON=',EPSILON
      PRINT*, 'IFLAG=',IFLAG, 'NSTEP=',I
      ENDIF
      ENDDO

```

- c Y(1) son los corrimientos de fase. Al calcular  $-DTAN(Y(1))/(AK)$  se obtiene la longitud de dispersión

```

      PRINT*, 'V0=',V0, 'a=', a, -DTAN(Y(1))/(AK)
      WRITE(3,500) V0, ' ', a, ' ', Y(1), ' ', -DTAN(Y(1))/(AK**3)
10  CONTINUE
      STOP
      END

```

===== A continuación se muestra la subrutina F =====

- c Subrutina F que resuelve la ecuación diferencial

```

SUBROUTINE F(r,Y,YP)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION Y(1),YP(1)
COMMON/ENERGY/ak,V0,b

      akr = ak*r
      V=-V0*EXP(-(2*r)/b)           !Amplitud del potencial
      YP(1) = -(V/ak)*(DSIN(akr+Y(1)))**2 !Ecuación A.2 de este Apéndice

RETURN
END

```



# APÉNDICE **B**

## Polinomios para la región BCS.

En este Apéndice se muestra cómo obtener los polinomios de la función analítica para la región de longitudes de dispersión negativas, Ec. 4.28 del Capítulo Cuatro, la cual es:

$$\varphi_{apx}(r) = \frac{1}{r} J_0(z_0 e^{-r/b}) e^{-m\omega r^2/4\hbar} (1 + c e^{-2r/b}) P(r/b). \quad (\text{B.1})$$

Esta función es la función de onda de la coordenada relativa utilizada en la simulación Monte-Carlo de muchas partículas.

Para obtener los polinomios se utiliza el programa que encuentra numéricamente la función de onda solución de la ecuación de Schrödinger unidimensional para la coordenada relativa del problema de dos cuerpos interactuantes y confinados, que corresponde a la ecuación 4.24 del Capítulo Cuatro, la cual es:

$$-\frac{d^2 U}{d\rho^2} + \frac{1}{4}\rho^2 U - \frac{V_0}{\hbar\omega} e^{-\frac{2\rho}{b}} U = \frac{\epsilon}{\hbar\omega} U; \quad (\text{B.2})$$

El programa se hizo para el potencial exponencial pero se puede ajustar para cualquier potencial de interacción de corto alcance. Una vez que se obtiene la función de onda numérica  $f_{num}$  se obtiene numéricamente la razón

$$\frac{f_{num}}{\frac{1}{r} J_0(z_0 e^{-r/b}) e^{-m\omega r^2/4\hbar}} = (1 + c e^{-2r/b}) P(r/b) \quad (\text{B.3})$$

En el caso que  $|V_0| \leq (z_0/b)^2 \hbar\omega$ . se tiene que  $c = 0$  y se obtienen los polinomios.

Una vez que se tiene la razón dada por la ecuación (B.3), se hace un ajuste a un polinomio de grado  $N$ , y se obtienen los coeficientes  $C_i$ :

$$P\left(\frac{r}{b}\right) = \sum_{i=0}^N C_i \left(\frac{r}{b}\right)^i \quad (\text{B.4})$$

Cabe mencionar que los polinomios que calculamos fueron de cuarto, quinto y sexto grado. A continuación se muestra el programa que encuentre la función numérica y calcula la razón para obtener el ajuste de los polinomios y un ejemplo particular del valor de los coeficientes.

```

PROGRAM POLINOMIO
USE DFPORT

c  Se definen los parámetros
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
EXTERNAL F
DIMENSION Y(2),YP(2),RR(15000),FR(15000)
DIMENSION FBY(15000), FB(15000), FBR(15000)

c  Se definen las variables comunes en las subrutinas
COMMON/ENERGY/epsilon,idatos
COMMON/POTENCIAL/a,b,V0,z1
COMMON/RESULTADOS/RR
COMMON/RESULTADOSF/FR

c  Se generan las posiciones
DO I=1,15000
  RR(I) = 0.D0
  FR(I) = 0.D0
ENDDO

c  Se dan las condiciones iniciales
  r_0 = 0.1D-6
  Y(1) = 0.D0
  Y(2) = .1D0
100  FORMAT (A4,F10.3,A1,F10.3,A2)
200  FORMAT (A1,F10.3,A1,F10.3,A2)

c  Se dan los parámetros del potencial y de energía
  EPSILON = 0.62342d0      !Energía del sistema de dos cuerpos

c  Se define el cociente de la Ec. (B.3)
  Ar = z1*EXP(-r/b)      !Argumento de la función Bessel
  JO = DBESJO(Ar)        !Función Bessel
  FB = JO*EXP(-(r*r)/4.d0) !Función Bessel y la Función
                          Exponencial de la Ec. 1
  FBR = FB/r             !Función anterior entre r
  FBY = Y(1)/ FBR        !Ec. (B.3) Y(1) es f_{num}

c  Se definen los pasos

```

```

      Idatos = 0
      NSTEP = 100
      dr     = 0.4D0
      r      = r_0
      DO I=1,NSTEP
      r_out  = r + dr
      RELERR = 1.D-12
      ABSERR = 1.D-16
      IFLAG  = 1
      MAXNUM = 10000

c     Se llama a la subrutina que resuelve la Ec. (B.2)
      Call DE(F,2,Y,r,r_out,RELERR,ABSERR,IFLAG,MAXNUM)
      ENDDO

      PRINT*,idatos
      idatos=idatos-1
c     Se llama a la subrutina que quita los datos repetidos
      CALL SINDATOSREPETIDOS(idatos,RR(I),FR(I))
      STOP
      END

===== A continuación se muestran las subrutinas =====
c     Subrutina que tiene la ecuación diferencial, Ec. (B.2).
      SUBROUTINE F(r,Y,YP)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION Y(2),YP(2),RR(15000),FR(15000)
      COMMON/ENERGY/epsilon,idatos
      COMMON/POTENCIAL/a,b,V0,z1
      COMMON/RESULTADOS/RR
      COMMON/RESULTADOSF/FR

      OPEN (1,FILE='Datos1.nb')
      OPEN (2,FILE='Datos2.nb')

      b = 0.0075d0           !Doble del alcance
      a = 0.0075705848d0    !Parámetro que define V0
      z1 = 2.4048255577D0   !Primer cero de Bessel
      V0 = -(z1/a)**2       !Amplitud del potencial
      car = 0.25D0          !indica la presencia de la trampa

c     Se define la ecuación diferencial, Ec 2.
      YP(1) = Y(2)
      YP(2) = car*r*r*Y(1)+V*Y(1)+a1*Y(1)*(a1+1.D0)/(r*r)- epsilon*Y(1)

```

```

200 FORMAT (A1,F12.5,A1,F12.5,A2)
300 FORMAT (F14.5,F14.5)
WRITE(1,200) '{',r,',',',',Y(1),'}',
WRITE(2,200) '{',r,',',',',Y(2),'}',
idatos = idatos+1
RR(idatos) = r
FR(idatos) = Y(1)
RETURN
END

```

c Subrutina que quita todos los valores repetidos.

```

SUBROUTINE SINDATOSREPETIDOS(nmaxd,RR,FR)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NMX=15000)
DIMENSION RR(NMX), FR(NMX), RN(NMX), FN(NMX), FNR(NMX)
COMMON/POTENCIAL/a,b,VO

OPEN (3,FILE='Datos1.dat', STATUS='OLD')
OPEN (7,FILE='Datos.nb')
OPEN (8,FILE='Datos.dat')
OPEN (9,FILE='promedios.dat')
OPEN (10,FILE='funcionj.nb')

PRINT*,NMAXD
200 FORMAT (A1,F14.5,A1,F14.5,A2)
ICOUNT = 1

DO I =2,NMAXD
IF(RR(I).GT.RR(I-1)) THEN
RN(ICOUNT) = RR(I-1)
FN(ICOUNT) = FR(I-1)*EXP(-((RR(I-1))**2)/4.DO)
ICOUNT = ICOUNT +1
ENDIF
ENDDO
PRINT*,ICOUNT
c Se normaliza la función de onda
SUM = 0.DO
SUM_X = 0.DO
SUM_EXP = 0.DO
DO I = 1, ICOUNT-2
RI = RN(I)
RIP = RN(I+1)
VRI = DEXP(-2.DO*RI/b)
VRIP = DEXP(-2.DO*RIP/b)
DRI = RIP - RI

```

```

    FI = FN(I)*FN(I)
    FIP = FN(I+1)*FN(I+1)
    SUM = SUM + 0.5D0*(FI+FIP)*DRI
    SUM_X = SUM_X + 0.5D0*(FI*RI + FIP*RIP )*DRI
    SUM_EXP = SUM_EXP + 0.5D0*(FI*VRI+ FIP*VRIP)*DRI
    END DO
DO I = 1, ICOUNT-1
    FN(I)=FN(I)/DSQRT(SUM)
    FNR(I)= (FN(I))/(DSQRT(SUM)*RN(I))      !Esta es la función R
WRITE(7,200)'{',RN(I),',',', FN(I),'}',
WRITE(10,200)'{',RN(I),',',', FNR(I),'}',
WRITE(8,*)RN(I),FN(I)
    END DO
SUM_X = SUM_X/SUM
SUM_EXP = VO*SUM_EXP/SUM
Print*,SUM
PRINT*,SUM_X
WRITE(9,*) SUM,SUM_X,SUM_EXP
RETURN
END

```

Un ejemplo para los valores del polinomio es el que se muestra a continuación. Se calculó para un valor de la longitud de dispersión  $\alpha = -5.98144$ ,  $\epsilon_0$  es la energía del estado base de dos cuerpos interactuantes y confinados.

$\alpha = -5.98144 \sqrt{\hbar/m\omega}$	$a = 0.0075060325$
$\epsilon_0 = 0.0630996060074678 [\hbar\omega]$	
$C_0 = 5.99995E-4 \pm 8.98741E-8$	
$C_1 = 1.08126E-4 \pm 4.87977E-7$	
$C_2 = -4.64102E-5 \pm 7.80372E-7$	
$C_3 = 1.83968E-5 \pm 4.63266E-7$	
$C_4 = -4.06778E-6 \pm 9.10314E-8$	

**Tabla B.1:** Ejemplo de los polinomios para  $\alpha = -5.98144$ .



## Cálculo de la amplitud del potencial.

Una vez que se ha escogido el potencial de interacción para los átomos de Fermi, es conveniente determinar el valor correspondiente a la amplitud del potencial. En el caso particular del potencial exponencial  $V_0 e^{-r/r_v}$ , en el Capítulo cinco de la presente tesis se mostró la expresión analítica para la longitud de dispersión  $\alpha$ , la cual es:

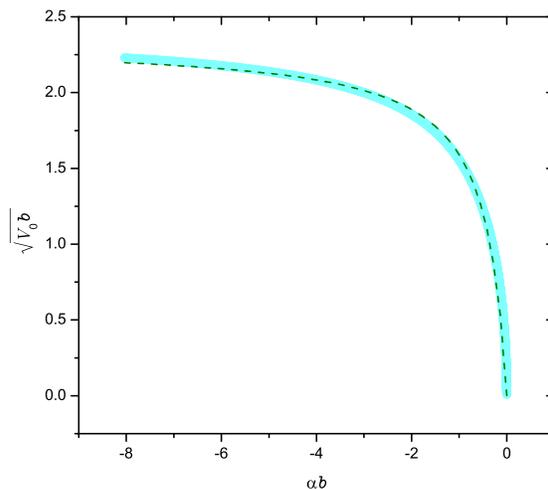
$$\alpha = -b \left[ \frac{\pi N_0 (b\sqrt{V_0 m}/\hbar)}{2 J_0 (b\sqrt{V_0 m}/\hbar)} - \log (b\sqrt{V_0 m}/2\hbar) - C \right]. \quad (\text{C.1})$$

De la ecuación anterior se observa que la longitud de dispersión depende en general del parámetro  $b$ , ( $r_v = b/2$ ) y de la amplitud del potencial  $V_0$ ; por lo que  $\alpha$  es función de dichos parámetros,  $\alpha = \alpha(b, V_0)$ ; o  $\alpha/b = f(\sqrt{V_0}b)$ . Entonces si se fija el valor del alcance del potencial, es posible obtener una expresión para la amplitud del potencial como función de la longitud de dispersión pues  $\sqrt{V_0}b = f^{-1}(\alpha/b) = g(\alpha/b)$ , y al despejar la amplitud de dispersión se tiene que  $V_0 = (g(\alpha/b)/b)^2$ .

Para poder obtener el valor de la amplitud del potencial se siguen los siguientes pasos:

- (i) Se fija un valor de  $b$ .
- (ii) Utilizando la ecuación (C.1) se grafica  $\alpha/b$  como función de  $\sqrt{V_0}b$ , para poder obtener una serie de parejas de puntos correspondientes a esos parámetros.
- (iii) Se grafica  $\sqrt{V_0}b$  como función de  $\alpha/b$ , y se hace un ajuste a la curva obtenida. En la Figura C.1, la línea sólida representa a  $\sqrt{V_0}b$  como función de  $\alpha/b$ , mientras que la línea en segmentos corresponde al ajuste a esta curva que corresponde a la función:

$$\sqrt{V_0}b = \frac{P_1 \left( \frac{|\alpha|}{b} \right)^{P_2}}{P_3 + \left( \frac{|\alpha|}{b} \right)^{P_2}} \quad (\text{C.2})$$



**Figura C.1:** En esta gráfica la línea sólida gruesa representa la amplitud  $\sqrt{V_0 b}$  como función de  $ab$ ; mientras que la línea en segmentos corresponde al ajuste con la función  $f_{aj}$ .

donde  $P1 = 2.75226$ ,  $P2 = 0.55650225$  y  $P3 = 0.77979$ . A partir de ecuación (C.4) se despeja  $V_0$  obteniendo así:

$$V_0 = \left( \frac{1}{b} \frac{P_1 \left( \frac{|\alpha|}{b} \right)^{P_2}}{P_3 + \left( \frac{|\alpha|}{b} \right)^{P_2}} \right) \quad (C.3)$$

Escribiendo la ecuación en términos del alcance del potencial  $r_v$  se obtiene la Ecuación (5.121) del Capítulo Cinco.

$$V_0 = \left( \frac{2}{r_v} \frac{P_1 \left( 2 \frac{|\alpha|}{r_v} \right)^{P_2}}{P_3 + \left( 2 \frac{|\alpha|}{r_v} \right)^{P_2}} \right) \quad (C.4)$$

# APÉNDICE D

## Estructura del programa Monte-Carlo variacional.

En este Apéndice se da una idea general de la estructura del programa utilizado para calcular el valor medio de la energía asociada a la mezcla de fermiones dada una función de prueba. Este programa está basado en uno desarrollado por el Dr. Genaro Toledo para interacciones de cuarks. El corazón del programa Monte-Carlo es el algoritmo Metrópolis, el cual consiste en:

- Escoger un valor inicial  $\vec{x}_0$ , el cual representa las posiciones de los átomos, y se evalúa la función de onda en ese valor  $\Psi_{EL}(\vec{x}_0)$ . Todos los pasos que se describan a continuación se hacen para los dos diferentes estados hiperfinos, en este caso si estos se denotan por  $\uparrow$  y  $\downarrow$ , se generan las posiciones  $\vec{x}_{0\uparrow}$  y  $\vec{x}_{0\downarrow}$  y se calcula entonces  $\Psi_{EL}(\vec{x}_{0\uparrow})$  y  $\Psi_{EL}(\vec{x}_{0\downarrow})$ .
- Mover aleatoriamente la posición a  $\vec{x} = \vec{x}_0 + \Delta$  y calcular la función  $\Psi_{EL}(\vec{x})$  en ese punto. Tanto para los estados  $\uparrow$  como para  $\downarrow$ .
- Evaluar la razón  $r = \left( \frac{\Psi_{EL}(\vec{x})}{\Psi_{EL}(\vec{x}_0)} \right)^2$ .
- Si  $r > 1$  se acepta el paso.
- Si  $r < 1$  se genera un número aleatorio  $x_2$  cuyo valor está entre cero y uno. Se hace  $x_2 = r_2$ , por lo que  $0 < x_2 < 1$ . Se compara  $r$  con  $r_2$ ; si  $r > r_2$  se considera un valor permitido del paso. Si no se considera el valor del paso anterior.
- Los pasos descritos se repiten un número suficiente de veces.
- Se define la aceptación la cual debe ser del orden de 0.5.

Una vez descrito el algoritmo Metropolis, a continuación mencionaré los ingredientes principales de nuestro programa:

- (A) Se definen los parámetros que caracterizan al sistema y que son de dos tipos: (i) aquellos relacionados con el potencial; (ii) aquellos relacionados con la función de onda de prueba. Los parámetros del potencial fijan un valor de la longitud de dispersión, estos son: su amplitud y su alcance. La función de onda de prueba depende del potencial elegido según se describió en el Capítulo 5. En la región BCS cuando se utiliza una función del tipo Eagles-Leggett es necesario dar los polinomios mencionados en la Eq. 4.28. En la región BEC se requiere dar la energía asociada al problema de dos cuerpos, la cual se calcula por medio del programa de integración numérica DSLEIG de las subrutinas IMSL de Fortran. Se especifica la región a explorar para el parámetro variacional  $\lambda$ .
- (B) Se escoge una posición aleatoria de las  $2N$  partículas,  $\vec{r}_{2N}$ , dentro de una región cuyo tamaño típico es del orden de 1.2 veces el radio de Fermi.
- (C) Se evalúa la función de onda de muchos cuerpos en ese punto aprovechando su estructura de forma de determinate.
- (D) Para poder utilizar el algoritmo Metrópolis de forma eficiente, se agrupa el número de pasos totales para la simulación, que se denota por  $ILD$ , en bloques; es decir, que si se tienen  $N$  datos y se quieren  $m$ -bloques, el número de bloques que se denota por  $ITAKE$  es  $ITAKE = N/m$ . Los resultados del algoritmo se dan en términos de este número de bloques.
- (E) Se define un valor que se denota por  $ITHERM$ , el cual indica el número de pasos para que el sistema se termalice, es decir, para que la simulación no depende de la posición  $\vec{r}_{2N}$  en la que empezó. Se define un número de pasos efectivo, el cual es  $ILD - ITHERM$  a partir del cual ya se considera la toma de datos efectiva, la cual ya no depende de las condiciones iniciales.
- (F) Se realiza el primer paso Monte Carlo variando la posición de una de las partículas en forma aleatoria alrededor del punto en un radio  $RC$ . Esta variación tiene efectos en el valor de la función de onda original, la cual puede evaluarse en términos de menores del determinante,  $Ec.$  (menores), los cuales a su vez se expresan en términos del inverso de la matriz transpuesta que es evaluada con el algoritmo de inversión de matrices adecuado.
- (G) Se aplica el algoritmo Metrópolis para evaluar la relevancia de la contribucion del punto  $\vec{r}_{2N} + \Delta\vec{r}_i$ . De ser aceptada, una vez superado el proceso de termalización, se evalúa en forma clásica el valor del potencial efectivo que en el caso de funciones tipo Eagles-Leggett involucra a  $V(\vec{r}_{2N} + \Delta\vec{r}_i)$  y a  $R^2$ . Cabe mencionar que en la simulación, los valores de expectación que involucran integrales de  $3N$ -dimensiones se

---

traducen en un promedio de los valores de la variable en cuestión sobre un muestreo, pesado con la probabilidad correspondiente.

$$\text{Integral } 3N - \text{dimensiones } O \frac{1}{\text{ITAKE}} \sum_i^{\text{ITAKE}} B_i; \quad B_i = \sum_{i=1}^n O_i. \quad (\text{D.1})$$

(H) Se repite el procedimiento a partir del paso (B) en *ILD* iteraciones.



# APÉNDICE E

## Ejemplo de la salida del programa.

A continuación se muestra un ejemplo de como es la salida típica del programa Monte-Carlo utilizado para hacer los cálculos de la mezcla balanceada de fermiones. La fila donde se encuentra el mínimo de la energía está coloreada.

```

INU = 165                                IND = 165
alpha = 4.000000000000000E-003          alphap = 4.000000000000000E-003
ILD = 10000                              ITHERM = 2000
EZERO = 1.500000000000000              EREL2B = 0.5
RFERMI = 4.46465114743044              ampot = 361449.122684174
ISD = 1368

                                     === O U T P U T ===
LAMBDA      VTQ      VTER,      VPTQ,      VPTER,      CMQ,      CMER,      ACC,      RC,      SUMA
0.1900     -346.6916  10.9138  350.4437  11.0130  2.5331  0.0044  0.486  0.169  6.6277
0.1890     -383.6100  8.6507  387.8088  8.7291  2.5557  0.0062  0.482  0.172  7.0963
      DATA REJECTED                                0.475908483804762          0.174124379274293          1
0.1880     -287.7655  6.6221  291.1957  6.6904  2.6054  0.0051  0.493  0.166  6.3767
0.1870     -232.6535  7.1875  235.3501  7.2560  2.6038  0.0040  0.494  0.168  5.6406
0.1860     -530.1890  10.7281  535.3775  10.8247  2.5957  0.0051  0.482  0.171  8.1236
0.1850     -264.1335  7.7455  266.6486  7.7934  2.7317  0.0037  0.489  0.173  5.5855
0.1840     -591.4310  9.6395  597.6620  9.7343  2.6855  0.0046  0.481  0.176  9.2545
0.1830     -167.6129  4.6839  169.6105  4.7273  2.7299  0.0039  0.481  0.179  5.0647
      DATA REJECTED                                0.474480907949433          0.181221299584408          1
0.1820     -349.5802  8.2994  353.1294  8.3663  2.6752  0.0039  0.485  0.172  6.5609
0.1810     -260.2650  6.3802  263.3958  6.4466  2.6846  0.0038  0.482  0.175  6.1511
0.1800     -237.6871  6.1828  240.4621  6.2399  2.7691  0.0044  0.483  0.177  5.8792

```

En las primeras seis líneas se muestran los datos iniciales del programa, los cuales son:

- ⊗ INU: Es el número de partículas  $N_{\uparrow}$ , para el estado con espín hacia arriba,  $\uparrow$ .
- ⊗ IND: Es el número de partículas  $N_{\downarrow}$ , para el estado con espín hacia abajo,  $\downarrow$ . En la presente tesis se consideró una mezcla balanceada por lo que  $INU = IND = 165$ .

- ⊗ **alpha**: En la notación utilizada en la presente tesis **alpha** =  $a$ . Este parámetro determina la amplitud del potencial pues  $V_0 = -(z_1/a)^2$ , donde  $z_1$  es el primer cero de Bessel.
- ⊗ **alphap**: En la notación utilizada en la presente tesis **alphap** =  $b$ , donde  $b$  es el doble del alcance del potencial,  $r_v = b/2$ .
- ⊗ **ILD**: Es el número de pasos utilizado en la simulación Monte-Carlo; este número varió desde 10000 hasta 100000.
- ⊗ **ITHERM**: Es el número de pasos utilizados para la termalización del sistema.
- ⊗ **EZERO**: Es la energía del centro de masa **EZERO** =  $3/2\hbar\omega$ .
- ⊗ **EREL2B**: Para la región de unitariedad y la región BCS, es la energía del estado base del sistema de dos partículas interactuantes y atrapadas, que en la presente tesis se denotó por  $\epsilon_0$ .
- ⊗ **RFERMI**: Es el radio de Fermi
- ⊗ **ampot**: Es la amplitud del potencial, que se denotó por  $V_0$ .
- ⊗ **ISD** Es la semilla que se utiliza. Es un número que aleatorio entre 1000 y 2500.

Después de escribir los datos de entrada del programa se muestran los datos de salida, que son los que se obtienen de la simulación, los cuales se muestran en una serie de filas y columnas. Los datos de salida son:

- ⊗ **LAMBDA**: Es el valor del parámetro variacional. Se fija el rango en el cual varía este parámetro. En el ejemplo que se ilustra, este varió desde 0.18 hasta 0.19, en intervalos de 0.001.
- ⊗ **VTQ**: Es el valor medio del potencial de interacción, corresponde al tercer término de la ecuación 5.131 del Capítulo 5.
- ⊗ **VTER**: Es el valor del error asociado en el cálculo al término VTQ.
- ⊗ **VPTQ**: Es el valor medio del potencial de interacción para las partículas que cambian sus permutaciones. Corresponde al último término de la ecuación 5.131 del Capítulo 5.
- ⊗ **VPTER**: Es el valor del error asociado en el cálculo al término VPTQ.
- ⊗ **CMQ**: Es el valor medio del hamiltoniano asociado a la coordenada del centro de masa del sistema. Corresponde al penúltimo término de la ecuación 5.131.
- ⊗ **CMER**: Es el error asociado en el cálculo al término CMQ

- ✠ ACC: Indica el criterio de aceptación. Se fija a un valor cercano a 0.5. en este caso escogimos que su valor estuviera en el rango de  $0.5 \pm 0.02$ .
- ✠ RC: Es el radio en el que se empieza a hacer el muestreo.
- ✠ SUMA: Es el valor medio del hamiltoniano del sistema, es decir, la energía total.

El ejemplo que se ilustra corresponde al caso de unitariedad, para un valor del alcance del potencial  $r_v = 0.002$ , por lo que corresponde a un valor de  $b = 0.004$ . En este caso se dejó variar el parámetro variacional entre (0.19 y 0.18) en intervalos de 0.001.

Cuando en la salida hay un mensaje que dice `DATA REJECTED`, significa que para el valor siguiente de  $\lambda$ , el valor de la aceptación estaba fuera del rango que se le impuso dado un cierto valor del radio crítico. En este caso nosotros utilizamos que el valor de la aceptación fuera entre  $0.5 \pm 0.02$ . En el primer `data rejected` mostrado en la salida ejemplo, el valor después del `data rejected` indica la aceptación obtenida, en este caso se puede ver que la aceptación es menor que 0.48 por lo que fue rechazada, esto se debe a que el valor del radio crítico que es donde se hace el muestreo estadístico no es el adecuado. En ese mismo renglón, el tercer valor corresponde al radio crítico rechazado. Mientras que el último valor es un contador que indica el número de datos rechazados, en este caso es 1 porque solo se rechazó un dato, este contador se deja variar hasta un cierto número de veces.

En el ejemplo de la salida del programa, hay un renglón coloreado que indica cual es el valor mínimo de la energía para esa corrida en particular. En este caso corresponde a una energía de 5.0647 para un valor del parámetro `LAMBDA` de 0.183.



# Bibliografía

- [1] 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**, 198-201 (1995).
- [2] B. DeMarco and D. S. Jin. *Onset of Fermi degeneracy in a trapped atomic gas*. Science **285**, 1703-1706 (1999).
- [3] J. Harold Metcalf and Peter van der Straten. *Laser cooling and trapping*. Springer (1999).
- [4] V. I. Balykin, V. G. Minogin and V. S. Letokhov. *Electromagnetic trapping of cold atoms*. Rep. Prog. Phys. **63**, 1429-1510 (2000).
- [5] T. Bergeman, Gidon Erez and Harold J. Metcalf. *Magnetostatic trapping fields for neutral atoms*. Phys. Rev. A **35**, 1535-1546 (1987).
- [6] S. L. Rolston. *Magnetic trapping, evaporative cooling and Bose-Einstein condensation*. Latin-American School of Physics, XXXI ELAF. New Perspectives on Quantum Mechanics. Edited by S. Hacyan, R. Jáuregui and R. López-Peña. México, pp.91-99 (1998).
- [7] O. J. Luiten, M. W. Reynolds and J. T. M. Walraven. *Kinetic theory of the evaporative cooling of a trapped gas*. Phys. Rev. A **53**, 381-389 (1996).
- [8] W. Ketterle and N. J. van Druten. *Evaporative cooling of trapped atoms*. Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics **37**. Academic Press. San Diego 181-236 (1996).
- [9] Claude N. Cohen-Tannoudji and William D. Phillips. *New mechanism for laser cooling*. Phys. Today **43**, 10, 33-40 (1990).
- [10] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji. *Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradient: Simple theoretical models*. J. Opt. Soc. Am. B **6**, 11, 2023-2045 (1989).

- [11] Luis A. Orozco. *Laser cooling and trapping of neutral atoms*. Latin-American School of Physics, XXXI ELAF. New Perspectives on Quantum Mechanics. Edited by S. Hacyan, R. Jáuregui and R. López-Peña. México pp. 67-90 (1998).
- [12] Markus Greiner, Cindy. A. Regal and Deborah S. Jin. *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*. Nature **426**, 537-540 (2003).
- [13] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. Hecker-Denschlag and R. Grimm. *Bose-Einstein condensation of molecules*. Science **302**, 2101 (2003).
- [14] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic and W. Ketterle. *Observation of Bose-Einstein condensation of molecules*. Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003).
- [15] Kevin E. Strecker, Guthrie B. Partridge and Randall G. Hulet. *Conversion of an atomic Fermi gas to a long-lived molecular Bose gas*. Phys. Rev. Lett. **91**, 080406 (2003).
- [16] K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, S. R. Granade and J. E. Thomas *Observation of a strongly interacting degenerate Fermi gas of atoms*. Science **298**, 2179 (2002).
- [17] M. E. Gehm, S. L. Hemmer, S. R. Granade, K. M. O'Hara and J. E. Thomas. *Mechanical stability of a strongly interacting Fermi gas of atoms*. Phys. Rev. A **68**, 011401(R) (2003).
- [18] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker-Denschlag and R. Grimm. *Crossover from a molecular Bose-Einstein condensate to a degenerate Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **92**, 120401 (2004).
- [19] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman and W. Ketterle. *Condensation of pairs of fermionic atoms near a Feshbach resonance*. Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [20] T. Bourdel, J. Cubizolles, L. Khaykovich, K. M. F. Magalhães, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov and C. Salomon. *Measurement of the interaction energy near a Feshbach Resonance in a  $^6\text{Li}$  Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **91**, 020402 (2003).
- [21] T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, J. Zhang, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans and C. Salomon. *Experimental study of the BEC-BCS crossover region in Lithium 6*. Phys. Rev. Lett. **93**, 050401 (2004).
- [22] J. Cubizolles, T. Bourdel, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov, and C. Salomon. *Production of long-lived ultracold  $\text{Li}_2$  molecules from a Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **91**, 240401 (2003).

- [23] Joseph Kinast, Andrey Turlapov, John E. Thomas, Qijin Chen, Jelena Stajic and Kathryn Levin. *Heat capacity of a strongly interacting Fermi gas*. Science **307**, 1296 (2005).
- [24] Henning Heiselberg. *Fermi systems with long scattering lengths*. Phys. Rev. A. **63**, 064904 (2001).
- [25] Ho Tin-Lu. *Universal thermodynamics of degenerate quantum gases in the unitarity limit*. Phys. Rev. Lett. **92**, 090402 (2004)
- [26] Hui Hu, Peter D. Drummond and Xia-Ji Liu. *Universal thermodynamics of strongly interacting Fermi gases*. Nature Phys. **3**, 469-472 (2007).
- [27] F. Werner and Y. Castin. *Unitary gas in an isotropic harmonic trap: Symmetry properties and applications*. Phys. Rev. A. **74**, 053604 (2006).
- [28] S. Y. Chang and G. F. Bertsch. *Unitary Fermi gas in a harmonic trap*. Phys. Rev. A. **76**, 021603(R) (2007).
- [29] M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle. *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*. Nature **435**, 1047-1051 (2005).
- [30] Martin W. Zwierlein, Christian H. Schunck, André Schirotzek and Wolfgang Ketterle *Direct observation of the superfluid phase transition in ultracold Fermi gases*. Nature **442**, 54-58 (2006).
- [31] C. A. Regal. *Experimental realization of BCS-BEC crossover physics with a Fermi gas of atoms*. PhD. Thesis. December (2005).
- [32] Le Luo and J. E. Thomas. *Thermodynamic measurements in a strongly interacting Fermi gas*. Journal of Low Temperature Physics **154**, 1-29 (2009).
- [33] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman and E. A. Cornell. *Vortices in a Bose-Einstein condensate*. Phys. Rev. Lett. **83**, 2498-2501 (1999).
- [34] J. Hecker Denschlag, J. E. Simsarian, H. Häffner, C. McKenzie, A. Browaeys, D. Cho, K. Helmerson, S. L. Rolston and W. D. Phillips. *Bose-Einstein condensate in an optical lattice*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 3095-3110 (2002).
- [35] D. S. Jin, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell. *Collective excitations of a Bose-Einstein condensate in a dilute gas*. Phys. Rev. Lett. **77**, 420-423, (1996).
- [36] W. Ketterle and H. J. Miesner. *Coherence properties of Bose-Einstein condensates and atom lasers*. Phys. Rev. A **56**, 3291-3293(1997).

- [37] Diego A. R. Dalvit, Jacek Dziarmaga and Wojciech H. Zurek. *Decoherence in Bose-Einstein condensates: Towards bigger and better Schrödinger cats*. Phys. Rev. A. **62**, 013607 (2000).
- [38] G. Bruun, Y. Castin, R. Dum and K. Burnett. *BCS theory for trapped ultracold fermions*. Eur. Phys. J. D. **7**, 433-439 (1999).
- [39] J. Kinnunen, M. Rodríguez and P. Törma. *Pairing gap and in-gap excitations in trapped fermionic superfluids*. Science **305**, 1131-1133 (2004).
- [40] Henning Heiselberg and Ben Mottelson. *Shell structure and pairing for interacting fermions in a trap*. Phys. Rev. Lett. **88**, 190401 (2002).
- [41] M. A. Baranov, L. Dobrek and M. Lewenstein. *BCS pairing in a trapped dipolar Fermi gas*. New Journal of Physics **6**, 198 (2004).
- [42] D. S Petrov, C. Salomon and G. V. Shlyapnikov. *Weakly bound dimers of fermionic atoms*. Phys. Rev. Lett **93**, 090404 (2004).
- [43] D. A. Butts and D. S. Rokhsar. *Trapped Fermi gases*. Phys. Rev. A. **55**, 4346-4350 (1997).
- [44] Brandon P. van Zyl, Rajat K. Bhaduri, Akira Suzuki and Matthias Brack. *Some exact results for a trapped quantum gas at finite temperature*. Phys. Rev. A. **67**, 023609 (2003).
- [45] Nadia Sandoval-Figueroa and Víctor Romero-Rochín. *Thermodynamics of trapped gases: Generalized mechanical variables, equation of state, and heat capacity*. Phys. Rev. E. **78**, 061129 (2008).
- [46] Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii and Sandro Stringari. *Theory of ultracold Fermi gases*. Rev. Mod. Phys. **80**, 1215-1274 (2008).
- [47] R. Haussmann, W. Rantner, S. Cerrito and W. Zwerger. *Thermodynamics of the BCS-BEC crossover*. Phys. Rev. A. **75**, 023610 (2007).
- [48] Aurel Bulgac, Joaquín E. Drut and Piotr Magierski *Spin 1/2 fermions in the unitary regime: A superfluid of a new type*. Phys. Rev. Lett. **96**, 090404 (2006).  
Evgeni Burovski, Nikolay Prokof'ev, Boris Svistunov and Matthias Troyer. *Critical temperature and thermodynamics of attractive fermions at unitary*. Phys. Rev. Lett **96**, 160404 (2006)  
Aurel Bulgac, Joaquín E. Drut and Piotr Magierski. *Thermodynamics of a trapped unitary Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **99**, 120401 (2007).  
Fang Qin and Ji-sheng Chen. *Comparative study of the finite-temperature thermodynamics of a unitary Fermi gas*. Phys. Rev. A **79**, 043625 (2009).

- [49] G. M. Bruun and K. Burnett. *Interacting Fermi gas in a harmonic trap*. Phys. Rev. A **58**, 2427 (1998).
- [50] R. Jáuregui, R. Paredes and G. Toledo Sánchez. *Simple variational approach for an interacting Fermi trapped gas*. Phys. Rev. A. **69**, 013606 (2004).
- [51] J. Carlson, S. Y. Chang, V. R. Pandharipande and K. E. Schmidt. *Superfluid Fermi gases with large scattering length*. Phys. Rev. Lett. **91**, 050401 (2003).
- [52] S. Y. Chang, V. R. Pandharipande J. Carlson and K. E. Schmidt *Quantum Monte Carlo studies of superfluid Fermi gases*. Phys. Rev. A **70**, 043602 (2004).
- [53] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras and S. Giorgini. *Equation of state of a Fermi gas in the BEC-BCS Crossover: A quantum Monte Carlo study*. Phys. Rev. Lett. **93**, 200404 (2004).
- [54] S. Y. Chang and V. R. Pandharipande. *Ground-state properties of Fermi gases in the strong interacting regime*. Phys. Rev. Lett **95**, 080402 (2005).
- [55] P. Pieri, L. Pisani and G. C. Strinati. *Comparison between a diagrammatic theory for the BCS-BEC crossover and quantum Monte Carlo results*. Phys. Rev. B **72**, 012506 (2005).
- [56] J. von Stecher, Chris H. Greene and D. Blume. *BEC-BCS crossover of a trapped two-component Fermi gas with unequal masses*. Phys. Rev. A **76**, 053613 (2007).
- [57] R. Jáuregui, R. Paredes and G. Toledo Sánchez. *BEC-BCS crossover of a trapped Fermi gas without using the local density approximation*. Phys. Rev. A. **76**, 011604(R) 2007.
- [58] J. von Stecher, Chris H. Greene and D. Blume. *Energetics and structural properties of trapped two-component Fermi gases*. PRA **77**, 043619 (2008).
- [59] S. K. Adhikari. *Universal behavior of a trapped Fermi superfluid in the BCS-unitary crossover*. Phys. Rev. A **79**, 023611 (2009).
- [60] H. Hu, X. J. Liu and P. D. Drummond. *Equation of state of a superfluid Fermi gas in the BCS-BEC crossover*. Europhys. Lett. **74**, 574-580 (2006).
- [61] Yong-il Shin *Determination of the equation of state of a polarized Fermi gas at unitarity*. Phys. Rev. A **77**, 041603(R) (2008).
- [62] S. Y. Chang. *Equation of state and phases of a polarized unitary Fermi gas*. Phys. Rev. A **77**, 051602(R) (2008).
- [63] G. E. Astrakharchik. *Local density approximation for a perturbative equation of state*. Phys. Rev. A **72**, 063620 (2005).

- [64] W. Y. Zhang, C. R. Ma and Y. L. Ma. *Phenomenological Equation of state and density profiles of strongly interacting trapped superfluid Fermi gases with arbitrary atom numbers*. J. Low. Temp. Phys. (2010).
- [65] W. Vincent Liu. *Effective theory of excitations in a Feshbach-resonant superfluid*. Phys. Rev. Lett. **96**, 080401 (2006).
- [66] J. Carlson and Sanjay Reddy. *Asymmetric two-component fermion systems in strong coupling*. Phys. Rev. Lett. **95**, 060401 (2005).
- [67] V. R. Pandharipande and K. E. Schmidt. *Variational calculations of simple Bose systems*. Phys. Rev. A **15**, 2486-2495 (1977).
- [68] V. R. Pandharipande and H. A. Bethe. *Variational methods for dense systems*. Phys. Rev. C **7**, 1312-1328 (1973).
- [69] Daniel Schiff and Loup Verlet. *Ground sstate of liquid Helium-4 and Helium 3*. Phys. Rev. **160**, 208-218 (1967).
- [70] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini. *Momentum distribution and condensate fraction of a fermion gas in the BCS-BEC crossover*. Phys. Rev. Lett. **95** 230405 (2005).
- [71] Alexandros Gezerlis and J. Carlson. *Strongly paired fermions: Cold atoms and neutron matter*. Phys. Rev. C **77**, 032801(R) (2008).
- [72] D. Blume. *Trapped polarized Fermi gas at unitarity*. Phys. Rev. A **78**, 13635 (2008).
- [73] R. Jáuregui, R. Paredes, L. Rosales-Zárata and G. Toledo Sánchez. *Simulation of an inhomogeneous Fermi gas through the BCS-BEC crossover*. e-print ArXiv:0803.0559.
- [74] George A. Baker *Neutron matter model*. Phys. Rev. C **60**, 054311 (1999).
- [75] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge and R. G. Hulet. *Observation of Fermi pressure in a gas of trapped atoms*. Science **291**, 2570-2572 (2001).
- [76] J. T. Stewart, J. P. Gaebler, C.A. Regal and D. S. Jin. *Potential energy of a  $^{40}\text{K}$  Fermi gas in the BCS-BEC crossover*. Phys. Rev. Lett. **97**, 220406 (2006).
- [77] D. M. Eagles. *Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors*. Phys. Rev. **186**, 456-463 (1969).
- [78] A. J. Leggett. *Diatomic molecules and Cooper pairs*. in Modern Trends in the Theory of Condensed Matter. Proceedings of the XVIth Karpacz Winter School of Theoretical Physics, Karpacz, Poland, (Springer-Verlag, Berlin) pp. 13-27 (1980).

- [79] Charles J. Joachain. *Quantum Collision Theory*. North-Holland Physics Publishing (1987). Para la descripción de las relaciones de unitariedad ver la sección 15.6.
- [80] John Robert Taylor. *Scattering theory: The quantum theory on nonrelativistic collisions*. Dover Publications, Inc. New York. 477pp (2006).
- [81] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum mechanics (Non-relativistic theory). Course of theoretical physics*. Volume 3 Third Edition. Pergamon Press, pp677 (1977). Para la descripción de los estados resonantes a bajas energías ver la sección §133. Para la condición de unitariedad ver la sección §135.
- [82] L. P. Pitaevskii. *Superfluid Fermi liquid in a unitary regime*. UFN, **178**, No.6 pp. 633-639 (2008). Talk on the meeting of the Physical Department of the Russian Academy of Sciences dedicated to the 100th anniversary of the birth of L. D. Landau (Moscow, January 22, 2008). También se puede encontrar en arXiv:0809.2675v1. En esta conferencia Pitaevskii indica que el límite de unitariedad es  $f = i/k$ .
- [83] Yvan Castin. *Basic theory tools for degenerate Fermi gases*. Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, Course CLXIV, Varenna 20-30 June 2006. M. Inguscio, W. Ketterle and C. Salomon eds, pp. 289-349 (2007). En la página 20 se indica la condición de unitariedad.
- [84] F. Calogero. *Variable phase approach to potential scattering*. New York, Academic Press (1967).
- [85] Thorsten Köhler, Krzysztof Góral and Paul S. Julienne. *Production of cold molecules via magnetically tunable Feshbach resonances*. Rev. Mod. Phys. **78**, pp. 1311-1361 (2006).
- [86] H. Friedrich. *Theoretical atomic physics*. Second Edition. Springer (2003).
- [87] H. Feshbach. *A unified theory of nuclear reactions*. Annals of Physics **5**, pp. 357-390 (1958).  
H. Feshbach. *A unified theory of nuclear reactions II*. Annals of Physics **19**, pp. 287-313 (1962).
- [88] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar and A. Axelsson *Resonances in ultracold collisions of  ${}^6\text{Li}$ ,  ${}^7\text{Li}$  and  ${}^{23}\text{Na}$* . Phys. Rev. A. **51**, 6, 4852-4861 (1995).
- [89] S. Inouye, J. Goldwin, M. L. Olsen, C. Thiecknor, J. L. Bohn and D. S. Jin. *Observation of Heteronuclear Feshbach resonances in a mixture of bosons and fermions*. Phys. Rev. Lett. **93**, 183201 (2004).
- [90] C. A. Stan, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach and W. Ketterle. *Observation of Feshbach resonances between two different atomic species*. Phys. Rev. Lett. **97**, 120402 (2006).

- [91] Cindy A. Regal, Christopher Ticknor, John L. Bohn and Deborah S. Jin. *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*. Nature **424**, 47-50 (2003).
- [92] C. A. Regal, M. Greiner and D. S. Jin. *Lifetime of molecule-atom mixtures near a Feshbach resonance in  $^{40}\text{K}$* . Phys. Rev. Lett. **92**, 083201 (2004).
- [93] S. Inouye, M.R. Andrews, J. Stenger, H. J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn and W. Ketterle. *Observation of Feshbach resonance in a Bose-Einstein condensate*. Nature **392**, 151-154 (1998).
- [94] W. Ketterle and M. W. Zwierlein. *Making, probing and understanding ultracold Fermi gases*. Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, Course CLXIV, Varenna 20-30 June 2006. M. Inguscio, W. Ketterle and C. Salomon eds. (2007).
- [95] W. C. Stwalley. *Stability of spin-aligned hydrogen at low temperatures and high magnetic fields: New field-dependent scattering resonances and predissociations*, Phys. Rev. Lett. **37**, 1628-1631 (1976).  
E. Tiesinga, B. J. Verhaar and H. T. C. Stoof. *Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions*. Phys. Rev. A. **47**, 4114-4122 (1993).
- [96] P. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen and B. J. Verhaar. *Observation of a Feshbach resonance in cold atom scattering*. Phys. Rev. Lett. **81**, 69-72 (1998).  
J. Stenger, S. Inouye, M. R. Andrews, H. J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn and W. Ketterle. *Strongly enhanced inelastic collisions in a Bose-Einstein condensate near Feshbach resonances*. Phys. Rev. Lett. **82**, 2422-2425 (1999).
- [97] Matthias Weidemüller and Claus Zimmermann (Eds.) *Interactions in ultracold gases. From atoms to molecules*. Wiley 312pp. (2003).
- [98] Brian Bransden and Charles Joachain. *Physics of atoms and molecules*. Segunda Edición. Prentice Hall 1114pp. (2003). Ver pp. 881-889.
- [99] A. Migdall, J. Prodan, W. Phillips, T. Bergeman and H. Metcalf. *First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms*. Phys. Rev. Lett. **54**, 2596-2599 (1985).
- [100] William H. Wing *On neutral particle trapping in quasistatic electromagnetic fields*. Prog. Quant. Elect. **8**, 181 (1984).
- [101] Rudolf Grimm and Mathias Weidemüller *Optical dipole traps for neutral atoms*. arXiv:physics/ 9902072v1 (1999).
- [102] Roland Wester. *Course: Optical dipole traps for mixtures of cold atoms and molecules*. School on Ultracold Atoms and Molecules. Sao Carlos, Brasil. October (2005).

- [103] S. Chu, J. E. Bjorkholm, A. Ashkin and A. Cable. *Experimental observation of optically trapped atoms*. Phys. Rev. Lett. **57**, pp. 314-317 (1986).
- [104] E. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu and D. Pritchard. *Trapping of neutral Sodium atoms with radiation pressure*. Phys. Rev. Lett. **59**, 2631-2634 (1987).
- [105] Kris Helmerson. *Course: Bose-Einstein Condensates*. School on Ultracold Atoms and Molecules. Sao Carlos, Brasil. October (2005).
- [106] Balleza Dávila Enrique. *Átomos en redes ópticas, un modelo tridimensional, sencillo*. Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, Enero (2004).
- [107] P. Lett, R. Watts, C. Westbrook, W. D. Phillips, P. Gloud and H. Metcalf. *Observation of atoms laser cooled below the Doppler limit*. Phys. Rev. Lett. **61**, 169-172 (1988).
- [108] Y. Shevy, D. S. Weiss, P. J. Ungar and S. Chu. *Bimodal speed distributions in laser-cooled atoms*. Phys. Rev. Lett. **62**, 1118-1121 (1989).
- [109] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji. *Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited*. J. Opt. Soc. Am. B. **2**, No. 11, 1707-1720, November (1985).
- [110] A. Aspect, J. Dalibard, A. Heidmann, C. Salomon and C. Cohen-Tannoudji. *Cooling atoms with stimulated emission*. Phys. Rev. Lett. **57**, 1688-1691 (1986).
- [111] C. J. Pethick and H. Smith *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press. Second Edition 569 pp (2008).
- [112] Rudolf Grimm. *Ultracold Fermi gases in the BEC-BCS crossover: A review from the Innsbruck perspective*. Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, Course CLXIV, Varenna 20-30 June 2006. M. Inguscio, W. Ketterle and C. Salomon eds. (2007).
- [113] G. Roati, F. Riboli, G. Modugno and M. Inguscio. *Fermi-Bose quantum degenerate  $^{40}\text{K}$ - $^{87}\text{Rb}$  mixture with attractive interaction*. Phys. Rev. Lett. **89**, 150403 (2002).
- [114] F. Schreck, L. Khaykovich, K. L. Corwin, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles and C. Salomon. *Quasipure Bose-Einstein condensate immersed in a Fermi sea*. Phys. Rev. Lett. **87**, 080403 (2001).
- [115] S. R. Granade, M. E. Gehm, K. M. O’Hara and J. E. Thomas. *All-optical production of a degenerate Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **88**, 120405 (2002).
- [116] Z. Hadzibabic, C. A. Stan, K. Dieckmann, S. Gupta, M. W. Zwierlein, A. Görlitz and W. Ketterle. *Two species mixture of quantum degenerate Bose and Fermi gases*. Phys. Rev. Lett. **88**, 160401 (2002).

- [117] K. Dieckmann, C. A. Stan, S. Gupta, Z. Hadzibabic, C. Schunck and W. Ketterle. *Decay of an ultracold fermionic lithium gas near a Feshbach resonance*. Phys. Rev. Lett. **89**, 203201 (2002).
- [118] T. Loftus, C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn and D. S. Jin. *Resonant control of elastic collisions in an optically trapped Fermi gas of atoms*. Phys. Rev. Lett. **88**, 173201 (2002).
- [119] K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, S. R. Granade, M. E. Gehm, J. E. Thomas, V. Venturi, E. Tiesinga and C. J. Williams. *Measurement of the zero crossing in a Feshbach resonance of fermionic  ${}^6\text{Li}$* . Phys. Rev. A. **66**, 041401(R) (2002).
- [120] S. Jochim, M. Bartenstein, G. Hendl, J. Hecker-Denschlag, R. Grimm, A. Mosk and M. Weidemüller. *Magnetic field control of elastic scattering in a cold gas of fermionic lithium atoms*. Phys. Rev. Lett. **89**, 273202 (2002).
- [121] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, C. Chin, J. Hecker-Denschlag and R. Grimm. *Pure gas of optically trapped molecules created from fermionic atoms*. Phys. Rev. Lett. **91**, 240402 (2003).
- [122] C. A. Regal, M. Greiner and D. S. Jin. *Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs*. Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
- [123] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker-Denschlag and R. Grimm. *Collective excitations of a degenerate gas at the BEC-BCS crossover*. Phys. Rev. Lett. **92**, 203201 (2004).
- [124] Amit Daniel and Verbin Yosef. *Statistical Physics. An Introductory Course*. World Scientific Publishing Co. (1999).
- [125] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley & Sons. Segunda Edición. 493 pp. (1987). Para la sección de Termodinamica ver pág 275.
- [126] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Segunda edición. Jordan Hill, Oxford: Butterworth-Heinemann, 529pp. (1996).
- [127] Neil W. Ashcroft and N. David Mermit. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, pp. 826 (1976).
- [128] Y. Castin. *Coherent atomic matter waves*. Lectures notes of Les Houches Summer School, edited by R. Kaiser, C. Westbrook and F. David. EDP Sciences and Springer-Verlag pp.1-136, (2001).
- [129] E. Fermi. *Motion of neutrons in hydrogenous substances*. Ricerca Sci. **7**, 13 (1936).
- [130] H. Bethe and R. Peierls. *Quantum theory of the dipion*. Proc. R. Soc. London, Ser. A **148**, 146 (1935).

- [131] G. Breit. *The scattering of slow neutrons by bound protons. I. Methods of calculation.* Phys. Rev. **71**, 215 (1947); G. Breit and P. R. Ziesel. *The scattering of slow neutrons by bound protons. II. Harmonic binding-neutrons of zero energy.* Phys. Rev. **71**, 232 (1947).
- [132] John M. Blatt and Victor F. Weisskopf. *Theoretical nuclear physics.* Ed. John Wiley and Sons, New York, Segunda Edición, 864 pp. (1954). Para el capítulo 1 ver la pag 55, para el capítulo de dos cuerpos ver la pagina 76.
- [133] Kerson Huang and C. N. Yang. *Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction.* Phys. Rev. **105**, 767 (1957).
- [134] Jean Dalibard. *Collisional dynamics of ultracold atomic gases.* Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi” Course CXL: Bose-Einstein Condensation in gases, Varenna (1998). M. Inguscio, S. Stringari and C. Wieman (Eds.), IOS Press (Amsterdam, 1999).
- [135] Flugge Siegfried. *Practical quantum mechanics.* Springer. Segunda Edición, 287 pp. (1994). Para las expresiones de los corrimientos de fase ver páginas 244-247.
- [136] William Rarita and R. D. Present. *On the nuclear two-, three- and four-body problems.* Phys. Rev. **51**, 788-798 (1937).
- [137] L. E. C. Rosales-Zárate and R. Jáuregui. *Trapping effects on short range two body interactions.* Revista Mexicana de Física **55**, 221-225 (2009).
- [138] Thomas Busch, Berthold-Georg Englert, Kazimierz Rzążewski and Martin Wilkens. *Two cold atoms in a harmonic trap.* Foundations of Physics **28**, 549-559 (1998).
- [139] A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi. *Higher transcendental functions.* Vol. III. McGraw-Hill, New York, (1955).
- [140] Peter A. Becker. *Normalization integrals of orthogonal Heun functions.* J. Math. Phys. **38**, 3692 (1997).
- [141] J. P. Gaebler, J. T. Stewart, J. L. Bohn and D. S. Jin. *p-wave Feshbach molecules.* Phys. Rev. Lett. **98**, 200403 (2007).
- [142] A. J. Leggett. *Quantum liquids: Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems.* Oxford University Press, New York, 388 pp. (2006).
- [143] D. S. Jin and C. A. Regal. *Fermi gas experiments.* Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi”, Course CLXIV, Varenna 20-30 June 2006. M. Inguscio, W. Ketterle and C. Salomon eds. (2008).
- [144] L. N. Cooper. *Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas.* Phys. Rev. **104**, 1189-1190 (1956).

- [145] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer. *Microscopic theory of superconductivity*. Phys Rev. **106**, 162-164 (1957).
- [146] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer. *Theory of superconductivity*. Phys Rev. **108**, 1175-1204 (1957).
- [147] Oracio Navarro Chávez y Rafael Baquero Parra. *Ideas fundamentales de la superconductividad*. Universidad Nacional Autónoma de México (2007).
- [148] J. M. Blatt *Theory of superconductivity* Academic Press, New York (1974). Ver principalmente el capítulo 3 y 5.
- [149] Y. Castin. *Fermi gases, BEC-BCS crossover and strongly interacting regime*. Les Houches, 23 September (2004).
- [150] Elizabeth. A. Donley, Neil. R. Claussen, Sarah. T. Thompson and Carl. E. Wieman. *Atom-molecule coherence in a Bose-Einstein condensate*. Nature **417**, 529-533 (2002).
- [151] A. Perali, P. Pieri and G. C. Strinati. *Quantitative comparison between theoretical predictions and experimental results for the BCS-BEC crossover*. Phys. Rev. Lett. **93**, 100404 (2004).
- [152] C. Menotti, P. Pedri and S. Stringari. *Expansion of an interacting Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **89**, 250402 (2002).
- [153] J. J. Sakurai *Modern quantum mechanics*. Revised Edition. Addison-Wesley Publishing Company. Editor San Fu Tuan. (1994).
- [154] Steven E. Koonin. *Computational physics*. Benjamin Cummings, Menlo Park, (1986). Ver el Capítulo 8.
- [155] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller. *Equation of state calculations by fast computing machines*. J. Chem Phys. **21**, 1087-1092 (1953).
- [156] C. J. Horowitz, E. J. Moniz and J. W. Negele. *Hadron structure in a simple model of quark/nuclear matter*. Phys. Rev. D **31**, 1689-1699 (1985).
- [157] C. J. Horowitz and J. Piekarewicz. *Quark models of nuclear matter: (I). Basic models and ground-state properties*. Nucl. Phys. A. **536**, 669-696 (1992).
- [158] G. Toledo Sánchez and J. Piekarewicz. *Modeling the strangeness content of hadronic matter*. Phys. Rev. C **65**, 045208 (2002).
- [159] D. Ceperley, G. V. Chester and M. H. Kalos. *Monte Carlo simulation of a many-fermion study*. Phys. Rev. B **16**, 3081 (1977).

- [160] R. Jáuregui, R. Paredes, L. Rosales-Zárate and G. Toledo Sánchez. *An optimized description of a confined interacting Fermi system*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 065301 (2010).
- [161] J. E. Thomas, J. Kinast and A. Turlapov. *Virial theorem and universality in a unitarity Fermi gas*. Phys. Rev. Lett. **95**, 120402 (2005).
- [162] F. Werner. *Virial theorems for trapped cold atoms*. Phys. Rev. A. **78**, 025601 (2008).
- [163] S. Tan. *Generalized virial theorem and pressure relation for a strongly correlated Fermi gas*. Annals of Phys. **323**, 2987 (2008).
- [164] J. E. Thomas. *Energy measurement and virial theorem for confined universal Fermi gases*. Phys. Rev. A **78**, 013630 (2008).
- [165] T. Mehen. *On non-relativistic conformal field theory and trapped atoms: Virial theorems and the state-operator correspondence in three dimensions*. e-print arXiv:0712.0867v1.
- [166] D. T. Son. *Three comments on the Fermi gas at unitarity in a harmonic trap*. e-print arXiv:0707.1851v1.
- [167] L. E. C. Rosales and R. Jáuregui. *Virial relations for ultracold trapped Fermi gases with finite range interactions through the Bardeen-Cooper-Schrieffer-Bose-Einstein-condensate crossover*. e-print ArXiv:0909.0673. ACCEPTADO New Journal of Physics (2010).
- [168] G. M. Bruun. *Universality of a two-component Fermi gas with a resonant interaction* Phys. Rev. A **70**, 053602 (2004).
- [169] Peter Arnold, Joaquín E. Drut and Dam Thanh Son. *Next-to-next-to-leading-order epsilon expansion for a Fermi gas at infinite scattering length*. Phys. Rev. A **75** 043605 (2007).
- [170] Guthrie B. Partridge, Wenhui Li, Ramsey I. Kamar, Yean-an Liao and Randall G. Hulet. *Pairing and phase separation in polarized Fermi gas*. Science **311** 503 (2006).



# Trapping effects on short-range two-body interactions

L.E.C. Rosales-Zárate and R. Jáuregui

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,*

*Apartado Postal 20-364, México D.F. 01000, México,*

*e-mail: laura@fisica.unam.mx, rocio@fisica.unam.mx*

Recibido el 12 de marzo de 2009; aceptado el 18 de mayo de 2009

In contrast to conventional ideal Bose and Fermi degenerate gases, atoms in experimental ultracold gases interact among themselves and are trapped by an external potential. In this work, we consider two particles of mass  $m$  trapped by a 3D harmonic potential of frequency  $\omega$ , and interacting through an isotropic short range potential of intensity  $V_0$  and range  $b/2$ , with  $b/2 \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Eigenfunctions and eigenenergies are obtained and compared with those resulting (a) from an effective contact interaction and (b) in the absence of the trapping potential. Concepts like zero-resonance and binding energy, usually introduced for problems that allow a continuum spectra, are discussed for trapped particles.

*Keywords:* Two body interactions; trapped systems; finite range potential effects.

En contraste con los gases degenerados de Fermi y Bose ideales convencionales, experimentalmente los gases atómicos ultrafríos interactúan entre sí además de estar confinados por medio de un potencial externo. En este trabajo, estudiamos dos partículas de masa  $m$ , las cuales están atrapadas por medio de un potencial armónico tridimensional con frecuencia  $\omega$ , e interactúan a través de un potencial de corto alcance con intensidad  $V_0$  y rango  $b/2$ , siendo  $b/2 \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Se obtienen las eigenfunciones y eigenenergías, y se comparan con aquellas obtenidas: (a) a partir de una interacción de contacto; (b) en ausencia del potencial de confinamiento. Conceptos como resonancia-cero y energía de ligadura, que usualmente se introducen en problemas que pueden tener un espectro continuo, se discuten en el caso de partículas atrapadas.

*Descriptores:* Interacciones de dos cuerpos; sistemas atrapados; interactuantes; efectos de potenciales de rango finito.

PACS: 03.65.Ge; 03.65-w; 32.80.Lg

## 1. Introduction

In recent years, it has been possible to tune the interactions between atoms in dilute ultracold gases via Feshbach resonances. This is achieved by inducing slight variations on open and closed channel energies using magnetic fields [1]. For broad resonances, the binary interaction may be modeled by a single channel potential. Experiments are always performed with trapped atomic gases. The relevance of the system makes necessary to understand clearly the trapping effects on the behavior of the interacting particles.

Some general remarks must be done when comparing a collision process between interacting but otherwise free atoms, and interacting atoms trapped by an external potential. In the former case, in a single channel scenario, the scattering is usually described in terms of phase shifts. In the limit of low energies, the process is determined by the  $s$ -wave scattering length  $a_0$  disregarding the detailed form of the interaction potential. For positive (negative) values of  $a_0$  the particles experience an repulsive (attractive) effective contact interaction. In the case  $|a_0| \rightarrow \infty$ , a zero energy resonance occurs. This critical value of  $|a_0|$  corresponds to an infinite scattering cross-section due to the presence of a virtual state of zero energy; the potential is nearly strong enough to support an  $s$ -wave bound state.

In the case of interacting trapped atoms, the atomic two-body wave functions correspond always to bound states both for the relative and center of mass degrees of freedom. As a consequence, the scattering *in* and *out* states cannot be defined and the concept of phase shift loses meaning. However,

if the interaction potential has a range much smaller than the trapping natural length scale, it is still expected (and experimentally confirmed) that the scattering length defined in the absence of a trapping potential determines essential properties of the system at low temperatures.

Busch *et al.* [2] studied this problem in the case of a regularized contact interaction

$$V_{contact}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{m} \delta_{reg}^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (1)$$

$$= \frac{\sqrt{2}\pi\hbar^2 a_0}{m} \delta^{(3)}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \frac{\partial}{\partial r} r \quad (2)$$

and a spherical trapping potential of frequency  $\omega$ . For the  $s$ -states, they found an implicit equation for the energy eigenvalues  $E$ ,

$$\sqrt{2} \frac{\Gamma(-E/(2\hbar\omega) + 3/4)}{\Gamma(-E/(2\hbar\omega) + 1/4)} = \frac{\sqrt{\hbar/m\omega}}{a_0}, \quad (3)$$

and the explicit expression for the corresponding eigenfunctions

$$\varphi_0(r) = \frac{A}{2\sqrt{\pi^3}} e^{-\frac{r^2}{2}} \Gamma(\nu) U\left(-\nu, \frac{3}{2}, \frac{\hbar r^2}{m\omega}\right), \quad (4)$$

$$\nu = \frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{3}{4}.$$

The normalization constant  $A$  satisfies

$$|A|^2 = \sqrt{2}\pi a_0^2 \frac{\partial E}{\partial a_0} \quad (5)$$

and  $U$  is the hypergeometric function in standard notation. The expression for  $A$  can be found using similar procedures to those outlined in Ref. 3 and taking into account Eq. (3). Notice that at  $|a_0| \rightarrow \infty$ , the ground state energy is  $E_0 = \hbar\omega/2$ .

The purpose of this paper is to study the energy eigenvalues and eigenfunctions of two particles of mass  $m$  trapped in a harmonic potential of frequency  $\omega$  and interacting through an isotropic potential of finite range  $b/2 \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$ . The potential is chosen so that, in otherwise free space, it would admit a finite number of bound states as its intensity is varied. We compare the results for trapped and unconfined particles, and analyze the role of the scattering length defined for a binary collision in free space. Comparison is also made with the regularized contact interaction results given above. Thus, our study complements the work by Busch *et al.* where  $a_0$  is directly introduced into the effective interaction. Besides, our results provide a two-body correlated basis which can be used, for example, in many-body quantum Monte Carlo simulations of atomic degenerate gases [4]. In Monte Carlo calculations, for numerical reasons and because of conceptual problems in the  $|a_0| \rightarrow \infty$  limit, the contact interaction  $V_{contact}$  cannot be implemented directly [4, 5].

## 2. Two-body potential

Consider a two-body interaction potential of range  $b/2$  given by

$$V(r) = -V_0 e^{-2r/b}, \quad V_0 > 0 \quad (6)$$

where  $r$  denotes the relative distance between the particles. The Schrödinger equation

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V \right] \phi = E\phi \quad (7)$$

has analytical  $s$ -wave solutions [6]  $\phi(r) = v(r)/r$  both in the continuum

$$v(y) = c_1 J_{ib\sqrt{Em}/\hbar}(y) + c_2 J_{-ib\sqrt{Em}/\hbar}(y) \quad (8)$$

and in the bound states region

$$v(y) = c_+ J_{b\sqrt{|E|m}/\hbar}(y). \quad (9)$$

Here  $y = (b\sqrt{V_0 m}/\hbar)e^{-r/b}$  and  $J_\nu$  represents the Bessel function of the first kind of order  $\nu$ . By imposing the boundary condition at the origin,

$$c_1 J_{ib\sqrt{Em}/\hbar}(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) + c_2 J_{-ib\sqrt{Em}/\hbar}(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) = 0, \quad (10)$$

and the boundary condition at  $r \rightarrow \infty$ ,  $v \rightarrow \sin(kr + \delta_0)$ , and considering the limit  $E \rightarrow 0^+$ , the following expression is found for the  $s$ -wave scattering length:

$$a_0 = -b \left[ \frac{\pi}{2} \frac{N_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar)}{J_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar)} - \log(b\sqrt{V_0 m}/2\hbar) - C \right] \quad (11)$$

with  $N_0$  the Bessel function of the second kind and order zero, and  $C$  the Euler constant. Depending on the values

of the range parameter  $b$  and the intensity  $V_0$ , Eq. (11) illustrates the well known fact that the scattering length can be positive or negative although the two-body potential is always attractive. The scattering length diverges whenever  $J_0(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) = 0$ . If  $z_t, t = 0, 1, 2, \dots$  are the zeros of this Bessel function in increasing order, the potential  $V(r)$  only admits  $t$ -bound states for  $z_t < b\sqrt{V_0 m}/\hbar < z_{t+1}$ . The discrete eigenvalues are determined by the boundary condition at  $r = 0$ ,  $J_{b\sqrt{|E|m}/\hbar}(b\sqrt{V_0 m}/\hbar) = 0$ .

When the two-body collision process takes place in the presence of a spherical harmonic potential of frequency  $\omega$ , the two-body Schrödinger equation can be separated in a center of mass equation

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \mathbf{R}^2 \right] \Phi(\mathbf{R}) = E_{CM} \Phi(\mathbf{R}), \quad M=2m, \quad (12)$$

and a relative coordinate equation

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \mathbf{r}^2 - V_0 e^{-2r/b} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad \mu = \frac{m}{2}. \quad (13)$$

The former is the well known harmonic oscillator equation, and the latter can be numerically solved for given  $b$  and  $V_0$ .

In Table I, the ground energy,  $E_0$ , and the  $s$ -wave lowest eigenvalues  $E_i$  of Eq. (13) are illustrated for a given value of the potential range  $b/2$  and several potential depths  $V_0$ . We first consider  $V_0$  values between zero and a maximum  $V_{max}$  so that at most one bound state is admitted by the potential. The inverse of the scattering length covers the interval  $(-\infty, \infty)$  once. We observe that for interaction strengths

$$V_0 < z_0^2 \hbar^2 / (mb^2) = \tilde{v}_0$$

the system in the absence of the trapping potential, Eq. (7), has no bound states. Meanwhile, the energies for trapped particles are lower than the noninteracting value  $3/2\hbar\omega$ . At  $V_0 \simeq \tilde{v}_0$  the scattering length diverges and, for such a  $V_0$ , the confined system ground state has an energy eigenvalue near  $1/2\hbar\omega$  and the  $s$ -wave excited states of order  $n$  have energies  $\sim (2n + 1/2)\hbar\omega$ , as expected from Busch *et al.* calculations. As  $V_0$  increases the difference between the ground state energy for the particles in the presence and in the absence of the trapping potential tends to zero. Besides, the first excited state energy approaches  $3/2\hbar\omega$  as  $a_0 \rightarrow 0^+$ . In that limit the contact interaction in free space would admit a bound state with divergent binding energy. Here the finite value of  $V_0$  avoids this unphysical feature.

If the field intensity is further increased towards the second zero-energy resonance condition

$$V_0 \rightarrow z_1^2 \hbar^2 / (mb^2) = \tilde{v}_1$$

the *first* excited state energy of the trapped system approaches the  $1/2\hbar\omega$  eigenvalue. The other excited states are separated by a  $\sim 2\hbar\omega$  factor. For even larger  $V_0$ , we observe that the difference between the *first* excited state energy for trapped and unconfined atoms also tends to zero.

TABLE I. Lower discrete  $s$ -state relative motion energy eigenvalues of two particles interacting through the potential Eq. (6) with  $b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$ . When two rows are reported for a given  $a_0$  the upper corresponds to the interaction in the absence of a trapping potential and the lower when it is on.

$a_0$	$V_0$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$a_0$	$V_0$	$E_0$	$E_1$	$E_2$	$E_3$
$\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$	$[\hbar\omega]$
					-0.0584	28848.5	-4304.95			
-0.0525	3614.504	1.45885	3.43836	5.42338	-0.0584	28848.5	-4304.97	1.45460	3.43261	5.41691
					-0.1173	30515.2	-4820.49			
-0.1106	4720.985	1.41502	3.37331	5.34333	-0.1173	30515.2	-4820.43	1.41078	3.36830	5.33877
					-0.1804	31403.2	-5101.96			
-0.1879	5310.566	1.36008	3.29344	5.24771	-0.1804	31403.2	-5101.98	1.36631	3.30455	5.26333
					-0.5732	32937.2	-5599.0			
-0.5733	6017.906	1.14462	3.01448	4.94650	-0.5732	32937.2	-5599.0	1.14909	3.02777	4.96757
					$\infty$	33857.0	-5903.4			
$\infty$	6425.786	0.510656	2.52659	4.53714	$\infty$	33857.0	-5903.4	0.520239	2.54982	4.56705
2.1035	6545.231	-0.23188			2.0014	34152.3	-6002.0	-0.262403		
2.1035	6545.231	0.00000	2.33058	4.38997	2.0014	34152.3	-6002.0	-0.031234	2.34447	4.41396
0.5810	6876.584	-3.2487			0.5812	34943.3	-6268.6	-3.52506		
0.5810	6876.584	-3.2079	1.94716	4.07045	0.5812	34943.3	-6268.6	-3.48380	1.95525	4.08711
0.1952	7933.069	-34.580			0.1954	37779.3	-7250.0	-44.8408		
0.1952	7933.069	-34.576	1.66094	3.73393	0.1954	37779.3	-7250.1	-44.8365	1.66185	3.73652
0.1170	9253.132	-115.04			0.1176	41798.7	-8704.85	-177.821		
0.1170	9253.132	-115.04	1.59568	3.64153	0.1176	41798.7	-8704.9	-177.819	1.59631	3.64283
0.0524	14458.02	-774.04			0.0524	56857.6	-14699.7	-1334.76		
0.0524	14458.02	-774.04	1.54230	3.55782	0.0524	56857.6	-14699.6	-1334.73	1.54229	3.56315

All these numerical results are compatible with Eq. (3) valid for a range zero interaction, the comparison between our numerical solutions for the eigenenergies and those obtained by Busch *et al.* is shown in Fig. 1. It can be seen that the positive eigenvalues are always very similar for potential ranges  $b/2 < 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$ . As for the negative eigenvalues, the comparison between the ground state energy of the zero-range potential and of a potential with finite range  $b/2$  is poorer as the depth of the latter potential increases. Let us choose, for instance,  $a_0 = 0.581\sqrt{\hbar/m\omega}$  the Busch *et al.* equation gives the ground state energy  $E_0 = -2.9217\hbar\omega$ . For the exponential potential trapped system,  $E_0 = -3.2\hbar\omega$  if  $b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$  (see Table I), *versus*

$$E_0 = -2.96\hbar\omega = -\hbar^2/ma_0^2$$

for the contact interaction in free-space. Taking again  $b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$ , for  $a_0 = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$  the energy for the trapped system and a regularized delta potential is  $E_0 = -73.04\hbar\omega$ , *versus*  $E_0 = -115.0389\hbar\omega$  for the

$b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$  exponential potential (see Table I), *versus*

$$E_0 = -73.04\hbar\omega = -\hbar^2/ma_0^2$$

for the contact interaction in free-space. In order to get results closer to contact interaction, shorter ranges must be considered. For instance, if  $a_0 = 0.117011\sqrt{\hbar/m\omega}$ , for different values of the parameter  $b$  in the limit  $b \rightarrow 0$  we found: for  $b = 0.02\sqrt{\hbar/m\omega}$ , it turns out that  $E_0 = -99.261418\hbar\omega$ , while for  $b = 0.015$ , it results  $E_0 = -91.940596\hbar\omega$ . A numerical fit of the energy as a function of  $b$  using a second order polynomial predicts  $E_0 = -72.25\hbar\omega$  in good agreement with the zero-range energy reported above ( $E_0 = -73.04\hbar\omega$ ). If one is interested in obtaining results closer to the contact interaction ones, it is necessary to take into account more significant figures for the scattering length. For the potential ranges illustrated in the second column of Table I, excited states energies  $E_i$ ,  $i \geq 1$  coincide at least within the first three figures with the analytical result for the regularized delta function.

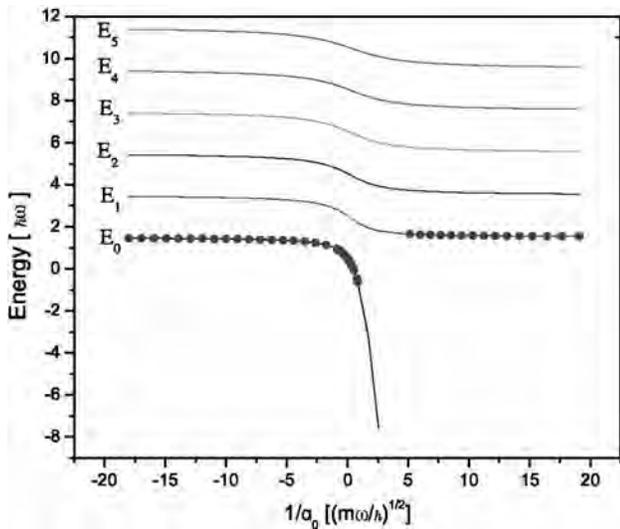


FIGURE 1. Lowest  $s$ -wave relative energy eigenvalues in units of  $\hbar\omega$  for two colliding trapped particles, Eq. (13), around the first resonance. They were evaluated by considering a potential range  $b/2 = 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$  and a strength  $V_0$  starting from  $V_0 \sim 0$  to the lowest  $|V_0|$  yielding  $a \rightarrow 0^+$ . The scattering length is measured in units of  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Circles show the energy obtained by Busch *et al.*

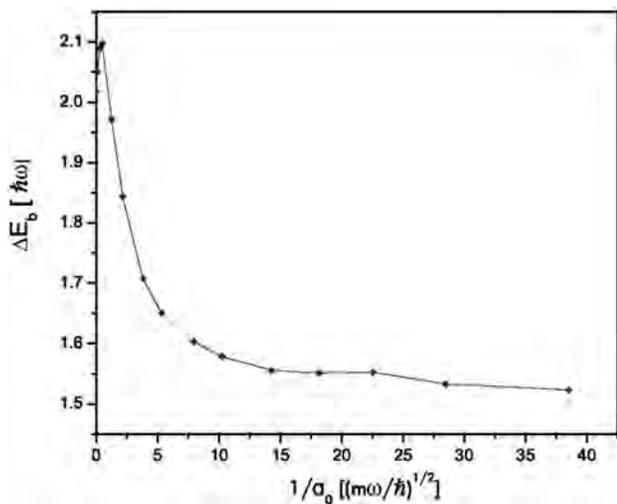


FIGURE 2. Difference between the binding energies as estimated with interacting trapped atoms and with interacting atoms in otherwise free space. The dots give the numerical values with errors smaller than the symbols used to plot them and the line is a numerical interpolation. The interaction intensity is chosen so that just one bound state is allowed for the free space system. The parameter  $b = 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$  was used for the numerical calculations.

All these results confirm  $a_0$  as the relevant parameter for determining the general features of the interaction. That is,  $a_0$  determines the eigenvalues  $E > 1/2\hbar\omega$  regardless of the number of states with  $E < 1/2\hbar\omega$ ; it seems that the states with  $E > 1/2\hbar\omega$  inherit the free space “scattering” states role, and the state with  $E = 1/2\hbar\omega$  replaces the zero-energy resonance at  $a_0 \rightarrow \infty$ . Notice that in the confined two-body

system the concept of binding energy must be revisited. For particles in free space, it is defined as the energy necessary to reach the continuum. According to the previous discussion, for trapped atoms it could be defined as the difference between the energy eigenvalue of the state under consideration and the lowest eigenvalue  $E > \hbar\omega/2$ . The scenario behind measuring such energies would be the dissociation of the molecule keeping the trapping potential on. In Fig. 2, the difference between the binding energies measured with and without harmonic trapping, as a function of the inverse of the scattering length, is illustrated.

The general behavior of the radial  $s$ -eigenfunctions  $v_{a_0}$  and  $u_{a_0}$  is illustrated for unconfined particles in Fig. 3 and for trapped particles in Fig. 4. For an interaction in otherwise free space, the zero-energy resonant function  $v_\infty(r)$

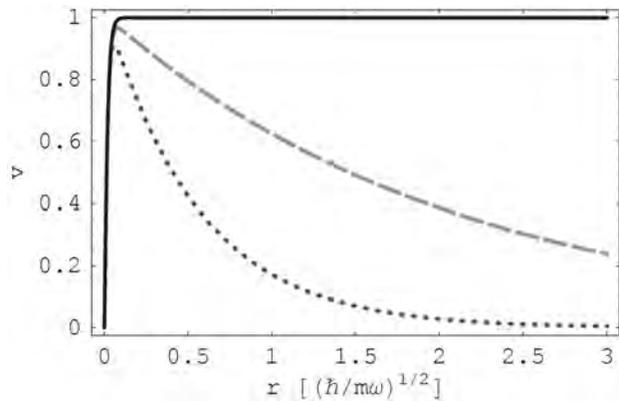


FIGURE 3. Radial function  $v_{a_0}(r)$ ,  $\phi_a(r) = u_a(r)/r$ , for interacting particles in otherwise free space, Eqs.(8-9). The zero-energy resonant function  $v_\infty(r)$  (solid line) tends to a nonzero constant as  $r \rightarrow \infty$ , while  $v_{2.1}(r)$  (dashed line) and  $v_{0.58}(r)$  (dotted line) correspond to increasingly bound states.

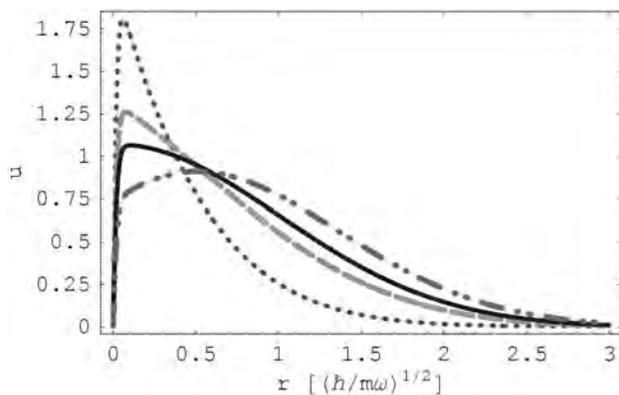


FIGURE 4. (Color online) Radial function  $u_{a_0}(r)$ ,  $\varphi_{a_0}(r) = u_{a_0}(r)/r$ , for two interacting particles in the presence of the trapping potential, Eq. (13). The dot-dashed curve corresponds to the ground  $s$ -state for a negative scattering length  $u_{-0.6}(r)$ , and the resonant function  $u_\infty(r)$  is given by the solid curve, while  $u_{2.1}(r)$  by the dashed one and  $u_{0.58}(r)$  by the dotted line correspond to positive scattering lengths. In this figure the wave functions have been properly normalized. Distances are measured in units of  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

(solid line) goes to a nonzero constant as  $r \rightarrow \infty$ , meanwhile  $v_{2.1}(r)$  (dashed line) and  $v_{0.58}(r)$  (dotted line) correspond to increasingly bound states. For trapped particles, before the zero-resonance condition is achieved the wave functions have, in general, a structure in which three regions are recognized, as illustrated by the dot-dashed line in Fig. 3. Very close to the origin, the slope of  $u_{-0.6}(r)$  is positive and large, so that for  $r \sim b/2$  it becomes positive but less than one until it reaches an extremum at  $1 > r \gg b/2$  and becomes negative. At the zero-resonance condition the intermediate region shrinks so that the extremum is reached at  $r \sim b/2$ ; nevertheless the function decays directly as the harmonic oscillator factor  $\exp(-m\omega r^2/\hbar)$ .

In the region of positive scattering lengths, an *ansatz* for the ground state function is:

$$\varphi(r) = v(y(r)) \exp(-m\omega r^2/\hbar) g(r)/r \quad (14)$$

with  $v$  defined in Eq. (9) for bound states in the absence of a trapping potential, it is numerically found that the values of the function  $g(r)$  are in the interval  $(0.99, 1.01)$  for  $b \leq 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$ . The structure of Eq. (14) for the eigenfunctions at  $|a_0| \rightarrow \infty$  allows us to understand the origin of the eigenvalue  $\sim 1/2\hbar\omega$ . In this case,  $v(y(r))$  takes care of the boundary condition  $v(0) = 0$  so that the effective equation for  $\psi(r) =: \varphi(r) \cdot r/v$  is almost identical to that of the one-dimensional harmonic oscillator without the requirement of becoming null at  $r = 0$ , thus admitting the possibility  $E \sim 1/2\hbar\omega$ .

For negative values of the scattering length, we found that the numerical solution to the ground state problem can be approximated using the following analytical compact representation:

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{apx}}(r) = & J_0(z_0 e^{-r/b}) e^{-m\omega r^2/4\hbar} \\ & \times (1 + c e^{-2r/b}) P(r/b)/r \end{aligned} \quad (15)$$

with  $c$  independent of  $r$  and  $P(r/b)$  a polynomial of fourth order, both of which depend on  $V_0$  and  $b$ . The coefficients of the polynomial and the parameter  $c$  were obtained using standard numerical fitting methods. For  $|V_0| \ll (z_0/b)^2 \hbar\omega$ , the polynomial  $P(r/b)$  is almost linear while for  $|V_0| \leq (z_0/b)^2 \hbar\omega$ , it turns out that  $c \approx 0$ . The accuracy of this approximation was measured by evaluating the ratio  $\varphi_{\text{apx}}(r)/\varphi_{\text{num}}(r)$  between the analytical approximate expression Eq. (15) and the numerical solution. This ratio yielded  $1 \pm 0.0001$  over the entire interval  $0 \leq r \leq 3\sqrt{\hbar/m\omega}$  for  $b/2 \leq 0.015\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

All the results discussed above are just an illustration of what we have found numerically for all values of the parameter  $b$  that we studied within  $b < 0.05\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

### 3. Conclusions

We have shown that even an extremely short range interaction between particles trapped in a harmonic potential, may significantly alter both the spectra and eigenfunctions in comparison with (i) noninteracting trapped particles and (ii) unconfined interacting particles. Our results are compatible with previous findings for  $s$ -states and a regularized  $\delta$  potential [2]. They allow us to establish a more clear relationship between contact interaction and finite range results for trapped interacting dilute gases.

Notice that states with higher angular momenta can also be analyzed and compared to pseudopotential contact interaction predictions. In those cases, the scattering is characterized by other parameters, *e. g.*, the  $p$ -scattering volume. It must also be emphasized that our results show the need to take trapping effects into account when binding energies are measured particularly near the limit  $a_0 \rightarrow \infty$ .

Although all calculations were presented for a particular potential  $V(r)$ , the qualitative features of our results are expected to apply in general for short range interaction potentials.

- 
1. E. Timmermans, P. Tommasini, M. Hussein, and A. Kerman, *Phys. Rep.* **315** (1999) 199; S.L. Cornish, N.R. Claussen, J.L. Roberts, E.A. Cornell, and C.E. Weiman, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1795; S. Jochim *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 273202; M. Greiner, C.A. Regal, and D.S. Jin, *Nature* **426** (2003) 537.
  2. T. Busch, B.G. Englert, K. Rzȃzewski, and M. Wilkens, *Foundations of Phys.* **28** (1998) 549.
  3. A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F.G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions* Vol. III (McGraw-Hill, New York, 1955); P.A. Becker, *J. Math. Phys.* **38** (1997) 3692.
  4. R. Jáuregui, R. Paredes, and G. Toledo-Sánchez, *Phys. Rev. A* **76** (2007) 011604(R).
  5. J. Carlson, S.Y. Chang, V.R. Pandharipande, and K.E. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 050401; S.Y. Chang, V.R. Pandharipande, J. Carlson, and K.E. Schmidt, *Phys. Rev. A* **70** (2004) 043602; G.E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, and S. Giorgini, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 200404.
  6. W. Rarita and R.D. Present, *Phys. Rev.* **51** (1937) 788.



# An optimized description of a confined interacting Fermi system

R Jáuregui<sup>1</sup>, R Paredes, L Rosales-Zárte and G Toledo Sánchez

Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, AP 20-364, México 01000 DF, Mexico

E-mail: [rocio@fisica.unam.mx](mailto:rocio@fisica.unam.mx)

Received 9 November 2009, in final form 6 January 2010

Published 2 March 2010

Online at [stacks.iop.org/JPhysB/43/065301](http://stacks.iop.org/JPhysB/43/065301)

## Abstract

We provide an efficient form to express the action of a many-body Hamiltonian of harmonically trapped interacting Fermi particles on wavefunctions built from paired states. The expression is suitable to numerically determine the ground state energy, regardless of the form of the two-body interaction. It takes advantage of the knowledge of the two-particle problem and the inherent properties of the matrix form of the many-body wavefunction. As an example, we evaluate the properties of a system composed of a balanced mixture of two families of fermions confined in a harmonic trap interacting through a short-range exponential potential. Numerical results for  $N \leq 10$  and  $N = 35, 56, 84$  and 165 particles of each family are reported. In the strong interacting regime corresponding to an infinite s-wave scattering length, our results give an upper bound to the Bertsch parameter for harmonically trapped systems  $(E/E_{\text{IFG}})^2 = 1 + \beta \leq 0.376 \pm 0.008$  with  $E$  the total energy and  $E_{\text{IFG}}$  the energy for the analogous ideal Fermi gas. The influence of the harmonic trap and the interaction potential is exhibited in one and two-body correlation functions.

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

## 1. Introduction

A wide variety of interacting Fermi systems can be found in nature, for example, nucleons in nuclei, electrons in superconductors, neutrons in neutron stars and cold deuterium atoms. Ultracold gases composed of two different hyperfine spin species are another example which nowadays has become accessible in the laboratory [1, 2]. Such systems can exhibit different features depending on the kind of interaction and the environment where the system is placed. The corresponding theoretical description, including all the quantum mechanical effects, is based on the knowledge of the interaction among the particles and the proper account of the environment. Different treatments and approaches have been elaborated to estimate and predict their corresponding behaviour. On one hand, the seminal theory proposed by Eagles [3] and Leggett [4] gave rise to effective field theories and self-consistent approaches that allow us to determine the chemical potential and the energy gap in the superfluid state in terms of the effective two-particle interaction and the particle density from coupled

integral equations. On the other hand, computational schemes offer an alternative route to establish and characterize the ground state properties. Quantum Monte Carlo simulation has proven to be a very useful tool to study such systems [5, 6].

Green function Monte Carlo (GFMC) and variational quantum Monte Carlo are probably the most used computational techniques to address the description of confined and unconfined Fermi systems [7–13]. One of the limitations of both methods is in their ability to handle a large number of particles. Besides, the intrinsic symmetry properties of the wavefunction in the fermion case lead to the well-known sign problem when a physical observable is evaluated using the GFMC method. This latter complication can be circumvented using the fixed-node approximation since it prevents the crossing of the nodal surface exhibited in the antisymmetric many-body wavefunctions. Regarding the variational approach, the sampling is weighted with the squared wavefunction and therefore it is free of the sign problem. For this case, in [6] an efficient algorithm was designed to update the wavefunction. Ceperley *et al* used the

<sup>1</sup> Author to whom any correspondence should be addressed.

fact that at any step, only one particle was being moved and that the trial wavefunction was the product of a Jastrow function and Slater determinants. In this work, we remark that this kind of algorithm can be implemented whenever the wavefunction can be written as a determinant of a matrix, including the case of many-particle wavefunctions conveniently written in terms of paired basis functions.

In almost all cases, the numerical determination of the energy can be simplified by exploiting the intrinsic properties of the system. For example, there are systems where the separability of ideal and interacting parts allows us to estimate the non-interacting term analytically, leaving the induced interaction terms to be evaluated numerically. In contrast, other systems are better handled by extracting the two-body interaction information assumed to be known and the many-body effects are set in a suitable form for numerical estimations. Here we will be interested in this case.

In this paper we work out a form to express the action of a many-body Hamiltonian of harmonically trapped interacting Fermi particles on wavefunctions built from paired states. The expression is suitable to numerically determine the ground state energy regardless of the form of the two-body interaction. It takes advantage of the knowledge of the two-particle problem and the inherent properties of the matrix structure of the many-body wavefunction. Our description together with an efficient matrix updating algorithm allows us to handle hundreds of particles.

As an application of the usefulness of having set the action of the Hamiltonian on the many-body wavefunction, we evaluate the properties of a system composed of a balanced mixture of two spin polarized fermions confined in a harmonic trap interacting through a short-range exponential potential. There is an analytical relationship between the potential parameters and the  $s$ -wave scattering length  $a$  which can drive  $a$  to take positive or negative values, corresponding to a Fermi gas in the Bose–Einstein condensate (BEC) or a Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) regime, respectively. We exploit this property to study the effect of the harmonic trap and the interaction potential in energies, densities and two-body correlation functions through the crossover of those regimes. We report numerical results for  $N \leq 10$  and  $N = 35, 56, 84$  and 165 particles of each family for those properties. We shall focus on the ground state of the gas in the crossover nearby the unitary limit,  $|a| \rightarrow \infty$ , and study the dependence of the energy on the potential range  $b/2$ .

## 2. Variational Monte Carlo simulations

Let us consider a confined system made of two equally populated families of fermions of mass  $m$ . The corresponding Hamiltonian is

$$H = \sum_i^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{j'}^N \left[ \frac{p_{j'}^2}{2m} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_{j'}) \right] + \sum_{i,j'=1}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{j'}|) \quad (1)$$

where the subindices  $i$  and  $j'$  correspond to the two different families,  $V_{\text{ext}}$  is the confining three-dimensional potential, which we assume to be a harmonic one, and  $V$  is the two-body interaction potential between particles of different families.

The ground state solution of the Schrödinger equation for the above Hamiltonian can be approached using Monte Carlo techniques for a given form of the confining and interaction potential. For a system of  $2N$  fermions, computing the Hamiltonian expectation value requires the evaluation of a  $6N$ -dimensional integral. Monte Carlo techniques allow us to perform such integration without evaluating the integrand at each of the quadrature points, but rather at only a relatively small representative sampling with the desired probability distribution. In particular, a variational approach imposes that the expectation value of the Hamiltonian with respect to a trial wavefunction  $\Psi_\lambda$  to be a minimum with respect to the variational parameter  $\lambda$ :

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = 0, \quad \text{where} \quad E(\lambda) = \frac{\langle \Psi_\lambda | H | \Psi_\lambda \rangle}{\langle \Psi_\lambda | \Psi_\lambda \rangle}. \quad (2)$$

This method can produce results very close to the true solution provided an appropriate guess of the trial wavefunction is made. Monte Carlo techniques can lead to the efficient evaluation of  $E_\lambda$  for each value of the variational parameter.

### 2.1. Schrödinger equation

In order to set the Schrödinger equation of the many-body system in a suitable form to estimate the ground state solution using Monte Carlo techniques, we can exploit the solution of the two-body problem. Here, we show how this can be systematically implemented for a harmonically confined system with arbitrary two-body-potential interaction.

Since our system is made up of interacting fermions, pairing between particles is expected to occur. Thus, for this case, we can consider the trial wavefunction, as proposed by Eagles [3] and later by Leggett [4],

$$\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \mathcal{A}[\phi(1, 1')\phi(2, 2') \dots \phi(N, N')], \quad (3)$$

with  $\mathcal{A}$  the antisymmetrizer operator that ensures the correct properties under particle exchange. In recent years, Eagles–Leggett wavefunctions were used in [9] for describing fermions interacting through a short-range square well potential in otherwise free space. Here, we take into account that the single-parameter variational wavefunction  $\phi(i, j')$  can be constructed as a variational extrapolation of the state solutions of the two-body problem in the external potential. Using the relative  $\mathbf{r}_{ij'} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{j'}$  and centre of mass  $\mathbf{R}_{ij'} = (\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_{j'})/2$  coordinates, it can be set as a product of functions:

$$\phi(i, j') \cong \varphi_{2b}(\mathbf{r}_{ij'})\varphi_{ho}(\sqrt{\lambda_{\text{EL}}}\mathbf{R}_{ij'}), \quad (4)$$

where  $\varphi_{2b}(\mathbf{r}_{ij'})$  takes care of the details of the two-body interaction potential, and the scaled harmonic oscillator wavefunctions  $\varphi_{ho}(\sqrt{\lambda_{\text{EL}}}\mathbf{R}_{ij'})$  modules the influence of the external potential through the variational parameter  $\lambda_{\text{EL}}$ . For a variational representation of the ground state we consider both the relative and centre of mass ground state wavefunctions

$$\phi(i, j') \cong \varphi_{2b}^0(\mathbf{r}_{ij'})e^{-\lambda_{\text{EL}}\mathbf{R}_{ij'}^2/2}. \quad (5)$$

The antisymmetrized wavefunction (3) can be explicitly written as

$$\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{i=1}^N \phi(i, \mathcal{P}(i)), \quad (6)$$

where the summation is taken over all possible permutations  $\mathcal{P}$  on the second entry. Now, we take advantage of the structure of  $\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}$ . We split the Hamiltonian of the system in a pair-like sum, using the centre of mass and relative coordinates of possible pairs as

$$H = \sum_i \left[ \frac{p_{i\mathcal{P}_0(i)}^2}{2\mu} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_{i\mathcal{P}_0(i)}) + V(r_{i\mathcal{P}_0(i)}) + \frac{P_{i\mathcal{P}_0(i)}^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{R}_{i\mathcal{P}_0(i)}) \right] + \sum_{i,j' \neq \mathcal{P}_0(i)} V(r_{ij'}) \quad (7)$$

where  $p$  and  $P$  are the corresponding relative and centre of mass momentum, and  $\mathcal{P}_0$  is any given permutation.

By identifying the terms corresponding to individual equations for the relative and centre of mass coordinates, and using the structure of equation (4) we can write

$$H\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = [N\epsilon_{2b} + N\tilde{\epsilon}_{ho}\lambda_{\text{EL}}]\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} + (1 - \lambda_{\text{EL}}^2) \sum_{i,\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,\mathcal{P}(i)}^2 \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) + \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \sum_{i,j' \neq \mathcal{P}(i)} V(r_{i,j'}) \prod_{l=1}^N \phi(l, \mathcal{P}(l)) \quad (8)$$

with  $\epsilon_{2b}$  the eigenvalue of the two-body problem and  $\tilde{\epsilon}_{ho}\lambda_{\text{EL}} = (n + 3/2)\hbar\omega\lambda_{\text{EL}}$  the eigenvalue of the scaled harmonic oscillator. In order to obtain a suitable form of equation (8) to use in the Monte Carlo simulation, we proceed to complete the potential by adding and subtracting the term used in the two-body solution, obtaining

$$H\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \left[ N\epsilon_{2b} + N\tilde{\epsilon}_{ho}\lambda_{\text{EL}} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right] \Psi_{\lambda_{\text{EL}}} + \sum_{i,\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \prod_{l \neq i} \phi(l, \mathcal{P}(l)) \cdot \left[ (1 - \lambda_{\text{EL}}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,\mathcal{P}(i)}^2 - V(r_{i,\mathcal{P}(i)}) \right] \phi(i, \mathcal{P}(i)), \quad (9)$$

which can also be written in terms of the minors  $C_{i\alpha}(\Psi_{\lambda_{\text{EL}}})$  associated with  $\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}$ :

$$\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} \equiv \sum_{\alpha=1}^N C_{i\alpha}(\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}) \phi_{i,\alpha}, \quad (10)$$

where  $\phi_{i,\alpha}$  represents any of the  $i$ -row wavefunctions. Using the minor definition we obtain

$$H\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \left[ N\epsilon_{2b} + N\tilde{\epsilon}_{ho}\lambda_{\text{EL}} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) \right] \Psi_{\lambda_{\text{EL}}} + \sum_{i,\alpha} C_{i,\alpha} \cdot \left[ (1 - \lambda_{\text{EL}}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,\alpha}^2 - V(r_{i,\alpha}) \right] \phi(i, \alpha).$$

One can also take advantage from the relation between minors and the elements of the inverse of the transposed matrix:

$$\bar{\phi}_{i,\alpha} \equiv (\phi^T)_{i\alpha}^{-1} = \frac{C_{\alpha,i}(\Psi_{\lambda_{\text{EL}}^T})}{\Psi_{\lambda_{\text{EL}}^T}} = \frac{C_{i,\alpha}(\Psi_{\lambda_{\text{EL}}})}{\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}}. \quad (11)$$

Thus, we can write

$$H\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \left[ N\epsilon_{2b} + N\tilde{\epsilon}_{ho}\lambda_{\text{EL}} + \sum_{i,j} V(r_{i,j}) + \sum_{i,\alpha} \phi_{i,\alpha} \bar{\phi}_{i,\alpha} \left[ (1 - \lambda_{\text{EL}}^2) \frac{M}{2} \omega^2 R_{i,\alpha}^2 - V(r_{i,\alpha}) \right] \right] \Psi_{\lambda_{\text{EL}}}. \quad (12)$$

Since the sets of functions  $\{\varphi_{2b}(\mathbf{r}_{ij'})\}$ , and  $\{\varphi_{ho}(\sqrt{\lambda_{\text{EL}}}\mathbf{R}_{ij'})\}$  are complete, any solution of the many-body Schrödinger equation can be written as a superposition of the trial functions  $\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}$  of the form (4). Equation (12) expresses the action of the Hamiltonian on  $\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}$  regardless of the form of the two-body interacting potential. This expression depends only on spatial coordinates and therefore its evaluation is quite convenient using Monte Carlo techniques. We can easily sample the system using a Metropolis algorithm, where the sequence of configurations are distributed according to  $|\Psi_{\lambda}|^2 / \langle \Psi_{\lambda} | \Psi_{\lambda} \rangle$ , and estimate the energy as a function of the variational parameter even for a large number of particles.

### 3. A cold interacting Fermi gas

At the present time, there is great interest in the universal properties of trapped Fermi gases in the BCS-BEC crossover regime, near a broad Feshbach resonance [1, 2, 17–25]. When the s-wave scattering length  $a$  is infinitely large compared to the interparticle spacing, and the effective range of the potential is very small compared to the interparticle spacing, the de Broglie wavelength and interparticle spacing determine the properties of the system, and the gas is universal, the so-called unitary gas [29]. As an application of the usefulness of having set the action of the Hamiltonian on the wavefunction  $\Psi_{\lambda_{\text{EL}}}$  in the form of equation (12), we consider a confined Fermi gas of atoms interacting through a short-range exponential potential. We shall focus on the ground state of the gas in the crossover nearby the unitary limit.

#### 3.1. Two-body wavefunction

In order to have the total functionality of the variational wavefunction (6), we need to specify the form of the two-body interaction and determine the wavefunction of the two interacting particles. In particular, we consider an isotropic attractive potential of finite range  $b/2$  given by

$$V(r_{i,j'}) = V_0 e^{-2|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{j'}|/b}, \quad V_0 < 0 \quad (13)$$

where the subindices denote two different atomic states. The potential admits a finite number of bound states as its strength  $V_0$  is varied.

When the two-body collision process takes place in the presence of an isotropic harmonic potential, the two-body

Schrödinger equation can be separated in a centre of mass equation

$$\left[ \frac{P_{ij'}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 R_{ij'}^2 \right] \Phi(\mathbf{R}_{ij'}) = E_{CM}\Phi(\mathbf{R}_{ij'}), \quad (14)$$

and a relative coordinate equation

$$\left[ \frac{p_{ij'}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r_{ij'}^2 + V(r_{ij'}) \right] \varphi(\mathbf{r}_{ij'}) = \epsilon\varphi(\mathbf{r}_{ij'}), \quad (15)$$

with  $\mu = m/2$  and  $M = 2m$ . The former is the isotropic harmonic oscillator equation whose solutions are well known, and the latter can be numerically solved given  $b$  and  $V_0$ .

At this time we should remark that there is a relationship between  $V_0$  and the s-wave scattering length  $a$ . A proper choice of  $V_0$  can drive  $a$  to take negative and positive values, corresponding with a Fermi gas in the BCS- and BEC-like states, respectively. It is expected that for short enough potential ranges, the general behaviour of the interacting Fermi gas at zero temperature is independent of the specific form of the attractive potential used to model the interaction; it just depends on the value of the scattering length.

It has been found that for the above potential, the s-wave scattering length is [14]

$$a = -b \left[ \frac{\pi}{2} \frac{N_0(\zeta)}{J_0(\zeta)} - \log(\zeta/2) - C \right], \quad (16)$$

where  $\zeta = (b\sqrt{|V_0|m/\hbar})$ ,  $J_0$  is the Bessel function of the first kind of order zero,  $N_0$  is the Bessel function of the second kind and order zero and  $C = 0.577\,215\,664\,901\dots$ , the Euler constant.

Denoting the zeros of the  $J_0$  Bessel function in increasing order by  $z_k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ), the potential  $V(r_{ij'})$  admits just  $k$ -bound states for  $z_k < \zeta < z_{k+1}$ . Here, the potential parameters  $V_0$  and  $b$  are chosen to be in the first resonance region around  $\zeta = z_0$ .

The discrete eigenvalues  $\epsilon$  are determined by the boundary condition at  $r_{ij'} = 0$ ,  $J_{b\sqrt{\epsilon|m/\hbar}}(b\sqrt{|V_0|m/\hbar}) = 0$ , where  $J_\nu$  represents the Bessel function of the first kind of order  $\nu$ . In the limit of  $b \rightarrow 0$ , the contact interaction energies are recovered [15].

Thus, the solution of equation (15) strongly depends on whether the scattering length is positive or negative.

For  $a < 0$ , we have found that the numerically obtained ground state wavefunction for the relative coordinate can be approximated by the following analytical compact expression:

$$\varphi_{\text{apx}}(r_{ij'}) = J_0(z_0 e^{-r_{ij'}/b}) e^{-m\omega r_{ij'}^2/4\hbar} (1 + c e^{-2r_{ij'}/b}) P(r_{ij'}/b)/r_{ij'} \quad (17)$$

where  $c$  is independent of  $r_{ij'}$  and  $P(r_{ij'}/b)$  is a fourth-order polynomial function, both of which depend on  $V_0$  and  $b$ .

For  $a > 0$  the *ansatz* for the ground state function is

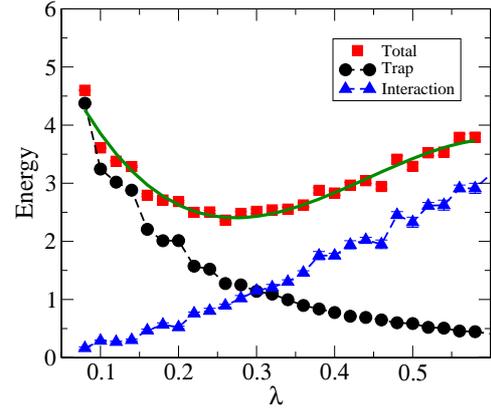
$$\varphi_{\text{apx}}(r_{ij'}) = v(y) e^{-m\omega r_{ij'}^2/4\hbar} q(r_{ij'})/r_{ij'} \quad (18)$$

where

$$v(y) = c_+ J_{b\sqrt{\epsilon|m/\hbar}}(y) \quad (19)$$

with  $y = \zeta e^{-r_{ij'}/b}$ , and  $q(r_{ij'})$  a numerically evaluated function whose values are between (0.99,1.01) for  $b \leq 0.03\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

The analytical approximations given by equations (17) and (18) to the exact solutions of the two-body problem are the ingredients needed in the study of the many-body system.



**Figure 1.** Energy behaviour as a function of the  $\lambda$  parameter for  $b/2 = 0.005\sqrt{\hbar/m\omega}$  and  $1/k_F a = 1.41996$ . The square, circle and triangle symbols correspond to the total, confinement and interaction energies, respectively. The solid line is a fit to the total energy curve.

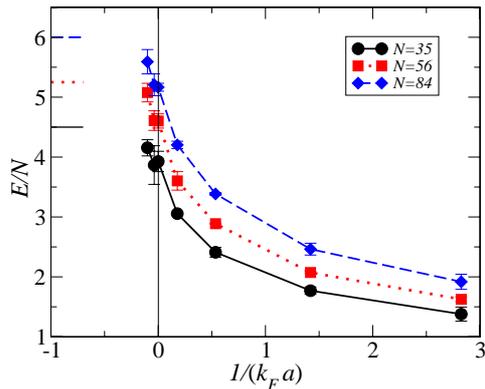
### 3.2. Energy estimation

The above results allow us to estimate approximately the energy of the ground state many-body system as a function of the variational parameter for a given range and strength of the interaction. We take the trial wavefunction with the form given by equation (5) with  $\varphi_{2b}^0$  of the form (17) or (18) depending on the sign of  $a$ .

From equation (12) one recognizes that the total energy is defined from a competition between the interaction and confinement energies. In figure 1 we illustrate the behaviour of these contributions as a function of the variational parameter. For this figure we have used  $N = 84$  particles of each species, a potential with range  $b/2 = 0.005\sqrt{\hbar/m\omega}$  and a scattering length fulfilling  $1/k_F a = 1.41996$ , with  $k_F$  the Fermi wave number. The square, circle and triangle symbols correspond to the total, confinement and interaction energies, respectively. The required statistics for the determination of these curves depends on the particular set of values for the range and number of particles. In these calculations, we have used  $6 \times 10^4$  total Monte Carlo steps with  $2 \times 10^4$  for thermalization to achieve convergence. The minimum of the total energy and the corresponding optimal variational parameter  $\lambda$  are obtained from a fit to the curve (solid line).

The s-wave scattering length  $a$  can be tuned by changing the two-body interaction strength, driving the system into a BCS or BEC state. Using the functionalities of the two-body wavefunctions for each case we can scan the energy evolution along the crossover region.

The proposed wavefunction allows us to explore any value of the scattering length. However, it is known that other many-body wavefunctions written in terms of one-body basis sets (for instance Slater determinants built from scaled harmonic oscillator one-body functions [26]) multiplied by a Jastrow function, yield lower bound estimates of the energy for *weak* interacting fermions [9, 13]. Besides, the description of a degenerate Fermi gas in the normal regime can also be done using hyperspherical coordinates in terms of an effective linear Schrödinger equation involving a single collective coordinate related to the mean radius of the gas [27]. The remaining

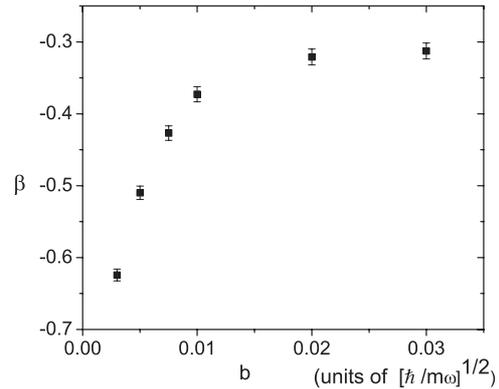


**Figure 2.** Energy per particle as a function of  $1/k_F a$ . The curves correspond to  $N = 35$  (circles),  $56$  (squares) and  $84$  (diamonds). Horizontal lines to the left indicate the asymptotic value in the free Fermi limit. For  $a > 0$  the binding energy of the two-body problem has been subtracted.

degrees of freedom are described as in the non-interacting system. Extensions of that formalism to the unitary limit can be done using renormalized contact interactions [28]. Meanwhile, the Eagles–Leggett trial wavefunction given by equations (3) and (5) does not incorporate the remanences of the shell structure intrinsic to the non-interacting problem. The mean value of the energy of a weakly interacting system using the function specified by equations (3) and (5) can be even *larger* than the energy of the ideal Fermi gas  $E_{\text{IFG}}$ .

Let us focus on results for which the trial wavefunction defined by equation (5) gives a lower energy estimate than the alternatives already mentioned. In figure 2, we show the energy as a function of  $1/k_F a$  for  $N = 35, 56$  and  $84$  and  $1/k_F a > -0.10029$ . These numbers of particles correspond to 4, 5 and 6 closed shells in a harmonic trap. In most of the calculations reported here, we have used a range  $b/2 = 0.005\sqrt{\hbar/m\omega}$ . In figure 2 the expected asymptotic values for the free Fermi gas are indicated with horizontal lines for each number of particles. Remarkably, the matching between the two regions, i.e. the unitary limit  $1/k_F a = 0$  is smoothly determined. In figure 3 we illustrate finite-range effects in that limit. From these data we can give an upper bound to the parameter  $\beta \leq -0.624 \pm 0.008$  defined by  $E = \sqrt{1 + \beta} E_{\text{IFG}}$ , for trapped systems and contact interactions [9, 13, 17–25]. In the literature the term  $1 + \beta$  is known as the Bertsch parameter.

In order to illustrate further the general features of the calculations at the unitary limit, in table 1 we show the ground state energies for small number of particles. In this case, convergence required  $1.5 \times 10^5$  Monte Carlo steps with a 5% of thermalization. We can see that for a given  $N$  and  $k_F b/2 < 0.02$ , the energy is a decreasing function of the potential range. The energy for  $N = 1$  as  $b \rightarrow 0$  is  $E/E_{\text{IFG}} = 2/3$ , which follows from the construction of the wavefunction. As a reference, in table 1 we include the energy values reported in [11] and [12]. Note that in those articles  $N$  denotes the total number of particles which is  $2N$  in the present paper. In [11] the fixed-node diffusion Monte Carlo method was used and a squared well potential



**Figure 3.** Energy of the unitary interacting gas in terms of the parameter  $\beta = (E/E_{\text{IFG}})^2 - 1$ , with  $E_{\text{IFG}}$  the ideal Fermi gas energy as a function of the potential range parameter  $b$ . In these calculations  $N = 165$ .

was considered with a range  $0.01\sqrt{\hbar/m\omega}$  for  $N > 2$ . The nodal structure was established by the antisymmetrization of the product of pair functions and the variational parameter was incorporated in the scale of a symmetrized product of harmonic oscillator functions that multiplied the first factor. Also in that reference, for  $N = 2$  the results using a Gaussian potential and different basis sets were compared; in particular, basis functions built by a product of the centre of mass ground state and a symmetrized product of Gaussian functions each of which depended on one of the  $N(N - 1)/2$  interparticle distances were considered. In [12] the energies were obtained from the fixed-node Green function Monte Carlo method and a potential  $V(r) = -8\text{sech}^2(2r/r_0)/mr_0^2$  was used, taking  $r_0 = 0.1\sqrt{\hbar/m\omega}$ . Due to the form of the potentials, the parameter  $r_0$  could be roughly considered as equivalent to  $2b$ . There, the basis is a Jastrow function multiplied by an antisymmetrized product of pair functions in a harmonic oscillator basis. We also found that for  $N > 2$  and  $b > 0.02\sqrt{\hbar/m\omega}$  our variational energies are higher than those found in [11, 12], it seems to be that the trial wavefunction used in that reference describes more accurately the exact solution of the problem for those potential ranges. However, our trial wavefunction takes special care of the expected behaviour of the wavefunction when the paired particles are very close,  $r_{ij} \ll \sqrt{\hbar/m\omega}$ . As a consequence, we expect that calculations using very short potential ranges can be performed with well-defined convergence values for high enough statistics. This has already let us study the energy dependence on the range for  $b \geq 0.01\sqrt{\hbar/m\omega}$  as reported in table 1 and figure 3.

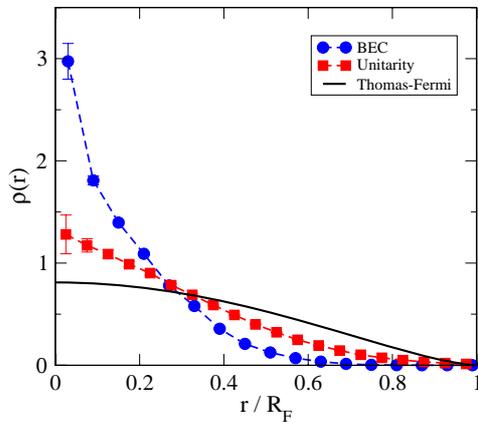
Since the values of the energy depend on the two parameters of the two-body interaction, in [16] a more extensive analysis on finite-range effects on the interacting gas through the BEC BCS crossover is explored.

### 3.3. Density and correlations

It is also interesting to explore properties reflecting the quantum nature of the particles moving under the influence of both the two-body interaction and the harmonic external confinement. Those properties are the density profile and the

**Table 1.** Ground state energies at the unitary limit for different number of particles  $N$  in a given hyperfine state of a balanced mixture of Fermi particles interacting through the potential given by equation (13). The energy values of the last two columns correspond to those reported in [11] and [12] where a squared well attractive potential ( $N > 2$ ), and a potential  $V(r) = -8 \operatorname{sech}^2(2r/r_0)/mr_0^2$  were used respectively. Results for  $N = 4$  and  $N = 10$  are compatible and more accurate than those already reported in [13] for  $k_F b/2 = 0.01$ .<sup>2</sup>

$N$	$E/E_{\text{IFG}}$ $k_F b/2 = 0.02$	$E/E_{\text{IFG}}$ $k_F b/2 = 0.015$	$E/E_{\text{IFG}}$ Reference [11]	$E/E_{\text{IFG}}$ Reference [12]
2	$0.638 \pm 0.007$	$0.622 \pm 0.007$	$0.6314 \pm 0.0011$	$0.64 \pm 0.015$
3	$0.697 \pm 0.011$	$0.669 \pm 0.011$	$0.6646 \pm 0.0023$	$0.669 \pm 0.008$
4	$0.738 \pm 0.008$	$0.696 \pm 0.008$	$0.6989 \pm 0.0017$	$0.700 \pm 0.006$
$N$	$E/E_{\text{IFG}}$ $k_F b/2 = 0.015$	$E/E_{\text{IFG}}$ $k_F b/2 = 0.01$	$E/E_{\text{IFG}}$ Reference [11]	$E/E_{\text{IFG}}$ Reference [12]
5	$0.681 \pm 0.007$	$0.611 \pm 0.015$	$0.6720 \pm 0.0016$	$0.688 \pm 0.008$
6	$0.694 \pm 0.003$	$0.610 \pm 0.008$	$0.6650 \pm 0.0016$	$0.672 \pm 0.009$
7	$0.703 \pm 0.008$	$0.629 \pm 0.008$	$0.6646 \pm 0.0013$	$0.682 \pm 0.010$
8	$0.734 \pm 0.004$	$0.666 \pm 0.008$	$0.6713 \pm 0.0013$	$0.693 \pm 0.007$
9	$0.737 \pm 0.006$	$0.667 \pm 0.009$	$0.6785 \pm 0.0013$	$0.706 \pm 0.002$
10	$0.757 \pm 0.009$	$0.686 \pm 0.009$	$0.6883 \pm 0.0013$	$0.720 \pm 0.007$

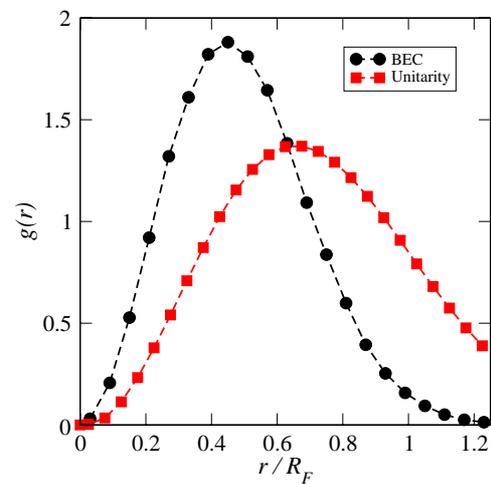


**Figure 4.** Density profiles for  $N = 84$  particles. Different curves correspond to BEC (circles), unitarity (squares) and free Fermi gas (solid line) regimes.

existing correlation among particles of the same family and particles belonging to different families. In the following we explore these for  $N = 84$  particles.

In figure 4 we illustrate the single-particle correlation function, that is, the density profile as a function of the distance to the centre of the harmonic trap. The shape of the density profiles associated with unitarity and BCS regimes looks very similar, and therefore we only exhibit the unitarity case for illustration purposes (square symbols). One can appreciate that the trap effect is reflected by decreasing the particle density until vanishing around the Fermi radius, i.e. the inhomogeneous environment created by the harmonic confinement. This can be compared with the density profile for an ideal Fermi gas in the Thomas–Fermi approximation [30] (solid line), noting that its distribution is slightly more concentrated at the centre of the trap. The profile in the BEC regime ( $1/k_F a = 2.825\,08$ ) is shown with circle symbols. A significant population is found at the centre of the trap, signalling the appearance of the condensate.

In order to exhibit the quantum behaviour of the fermionic particles, the two-particle correlation function for particles

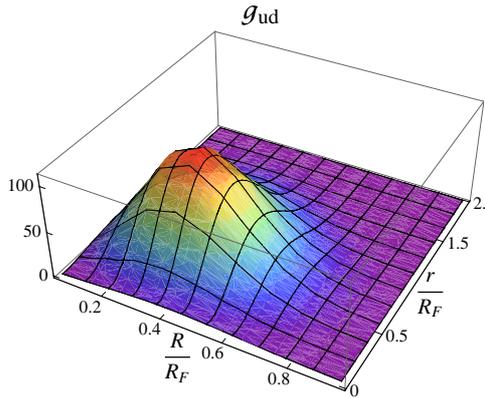


**Figure 5.** Normalized correlation function  $g(r)$  for particles in the same hyperfine state as a function of their relative distance. The square and circles correspond to unitarity and BEC ( $1/k_F a = 2.822\,508$ ) respectively. Distances are measured in units of  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ .

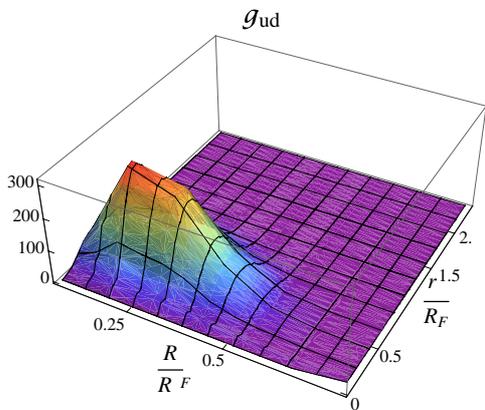
in the *same hyperfine state*,  $g(r)$ , was computed. The calculations involved finding the fraction of particles in the same hyperfine state within a relative distance ( $r, r + dr$ ), as generated by the Monte Carlo sampling, irrespective of the centre of mass position; it is normalized to  $\int g(r)dr = 1$ . Figure 5 illustrates the results at unitarity (squares) and BEC for  $1/k_F a = 2.825\,08$  (circles).

The Pauli blocking is exhibited by an absence of two atoms close to each other, which is a consequence of their fermionic nature. This behaviour is more evident at unitarity than in the molecular side, where the two atoms in the same hyperfine state can be found at shorter distances. These correlations

<sup>2</sup> For  $2N = 4$  particles the matrix elements involved in the calculation are twelve dimensional, by a proper selection of the integration variables at least the integrals in six dimensions can be performed analytically. The remaining at-most-six dimensional integrals can be evaluated numerically. The results are compatible with the energies reported in table 1.



**Figure 6.** Correlation function  $g_{ud}(r, R)$  for particles in different hyperfine states, as a function of their relative distance and centre of mass position. Unitarity case.



**Figure 7.** Correlation function  $g_{ud}(r, R)$  for particles in different hyperfine states, as a function of their relative distance and centre of mass position. BEC regime ( $1/k_F a = 2.822\ 508$ ).

decrease for long relative distances as a consequence of the presence of the trap.

In figures 6 and 7 we illustrate the two-particle correlation functions of atoms in different hyperfine states,  $g_{ud}(r, R)$  at unitarity and in the BEC ( $1/k_F a = 2.822\ 508$ ) regimes respectively. Molecular condensation effects are indicated by an enhancement of the correlations at very short relative distances in the BEC regime compared to unitarity. Accordingly, the molecules centre of mass distribution is reduced from  $R_{cm}/R_F \leq 0.9$  at unitarity to  $R_{cm}/R_F \leq 0.6$  at  $1/k_F a = 2.822\ 508$ .

#### 4. Conclusions

We have addressed the description of confined interacting Fermi particles in 3D. By taking advantage of the knowledge of the two-particle problem and the inherent properties of the matrix form of the many-body wavefunction, we provided a new form to express the action of the many-body Hamiltonian of harmonically trapped interacting Fermi particles on wavefunctions built from paired states. The

obtained expression is suitable for an efficient numerical evaluation of the mean value of the energy. Our description together with an appropriate matrix updating algorithm allows us to handle a large number of particles.

A system composed of a balanced mixture of two spin polarized fermions confined in a harmonic trap, interacting through a finite-range potential has been considered as a particular example. By taking into account the  $s$ -wave scattering length  $a$  which may take positive or negative values, we evaluated the ground state properties corresponding to a Fermi gas in the Bose–Einstein condensate (BEC) or a Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) regime respectively. Since the intrinsic nature of the long-range correlations is not well captured in the simplest trial wavefunction, the region explored in the BCS side was very limited, while the BEC side is more properly accounted for by this model. Most of the numerical results reported here for illustration correspond to  $N \leq 10$  and to  $N = 84$  particles on each family, but a higher number can be easily implemented. This required an optimization of the numerical subroutines to explore high statistics and obtain improved accuracy. In this way an upper bound of the universal  $\beta$  parameter was obtained for trapped particles,  $\beta = (E/E_{\text{IFG}})^2 - 1 \leq -0.624 \pm 0.008$ , which is lower than previous reported results for trapped particles’ calculations. This value is compatible with the later expectations obtained by other methods for untrapped particles [31]. Experimental measurements of  $\beta$  yielded  $\beta \sim -0.3$  [17],  $\beta = -0.49 \pm 0.04$  [18],  $\beta = -0.64 \pm 0.15$  [19],  $\beta = -0.68^{+0.13}_{-0.1}$  [20],  $\beta = -0.54 \pm 0.05$  [21],  $\beta = -0.54^{+0.05}_{-0.12}$  [22],  $\beta = -0.646 \pm 0.004$  [23]. Lately the values  $\beta = -0.59 \pm 0.02$ ,  $\beta = -0.565 \pm 0.015$  and  $\beta = -0.61 \pm 0.02$  [24] were inferred from measurements of the energy as a function of the entropy, of the sound velocity and of the cloud size ratio of a balanced mixture of  $^6\text{Li}$  atoms interacting through a 2900 Bohr radii scattering length.

We would like to stress that here, by explicitly including easily interpretable inhomogeneous features of the system, we are able to explore the trapped atoms as a whole as they evolve into the interacting regime. Also, the proposed method allows us to study systems with different forms of the two-body interaction including anisotropic ones.

#### Acknowledgments

We thank technical support of the Computational Division of Instituto de Física and D.G.S.C.A., U.N.A.M. and financial support from IN-114308; L.E.C.R.Z. acknowledges financial support provided by U.N.A.M.-D.G.A.P.A. through project IN-118609, and CONACyT through grant 191877.

#### References

- [1] DeMarco B and Jin D S 1999 *Science* **285** 1703
- [2] O’Hara K M, Hemmer S L, Gehm M E, Granade S R and Thomas J E 2002 *Science* **298** 2179
- [3] Eagles D M 1969 *Phys. Rev.* **186** 456

- [4] Leggett A J 1980 *J. Phys. (Paris) Colloq.* **41** C7  
Leggett A J 1980 Diatomic molecules and Cooper pairs  
*Modern Trends in the Theory of Condensed Matter (Proc. 16th Karpacz Winter School of Theoretical Physics, Karpacz, Poland)* (Berlin: Springer) pp 13–27
- [5] Pandharipande V R and Bethe H A 1973 *Phys. Rev. C* **7** 1312
- [6] Ceperley D, Chester G V and Kalos M H 1977 *Phys. Rev. B* **16** 3081
- [7] Carlson J, Morales J Jr, Pandharipande V R and Ravenhall D G 2003 *Phys. Rev. C* **68** 025802
- [8] Chang S Y, Pandharipande V R, Carlson J and Schmidt K E 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043602
- [9] Astrakharchik G E, Boronat J, Casulleras J and Giorgini S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 200404
- [10] Lee D 2006 *Phys. Rev. B* **73** 115112  
Lee D 2007 *Phys. Rev. B* **75** 134502
- [11] Blume D, von Stecher J and Greene C H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 233201
- [12] Chang S Y and Bertsch G F 2007 *Phys. Rev. A* **76** 021603
- [13] Jáuregui R, Paredes R and Toledo Sánchez G 2007 *Phys. Rev. A* **76** 011604
- [14] Rarita W and Present R D 1937 *Phys. Rev.* **51** 788
- [15] Rosales-Zárate L E C and Jáuregui R 2009 *Rev. Mex. Fís.* **55** 221
- [16] Rosales-Zárate L E C and Jáuregui R 2009 arXiv:0909.0673
- [17] Bourdel T, Cubizolles J, Khaykovich L, Magalhaes K M F, Kokkelmans S J J M F, Shlyapnikov G V and Salomon C 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 020402
- [18] Kinast J, Turlapov A, Thomas J E, Chen Q J, Stajic J and Levin K 2005 *Science* **307** 1296
- [19] Bourdel T, Khaykovich L, Cubizolles J, Zhang J, Chevy F, Teichmann M, Tarruell L, Kokkelmans S J J M F and Salomon C 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 050401
- [20] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Jochim S, Chin C, Hecker Denschlag J and Grimm R 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 120401
- [21] Partridge G B, Li W, Kamar R I, an Liao Y and Hulet R G 2005 *Science* **311** 503
- [22] Stewart J T, Gaebler J P, Regal C A and Jin D S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 220406
- [23] Haussmann R and Zwerger W 2008 *Phys. Rev. A* **78** 063602
- [24] Luo L and Thomas J E 2009 *J. Low Temp. Phys.* **154** 1
- [25] Nozières P and Schmitt S 1985 *J. Low Temp.* **59** 195  
Heiselberg H 2001 *Phys. Rev. A* **63** 043606  
Carlson J, Chang S-Y, Pandharipande V R and Schmidt K E 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 050401  
Heiselberg H 2001 *Phys. Rev. A* **63** 043606  
Perali A, Pieri P and Strinati G C 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 100404
- [26] Jáuregui R, Paredes R and Toledo Sánchez G 2004 *Phys. Rev. A* **69** 013606
- [27] Rittenhouse S T, Cavagnero M J, von Stecher J and Greene C H 2006 *Phys. Rev. A* **74** 053624
- [28] Rittenhouse S T and Greene C H 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 205302
- [29] Kinast J, Turlapov A, Thomas J, Chen Q, Stajic J and Levin K 2005 *Science* **307** 1296
- [30] Butts D A and Rokhsar D S 1997 *Phys. Rev. A* **55** 4346
- [31] Gezerlis A, Gandolfi S, Schmidt K E and Carlson J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 060403

# New Journal of Physics

The open-access journal for physics

## Virial relations for ultracold trapped Fermi gases with finite range interactions through the Bardeen–Cooper–Schrieffer Bose–Einstein-condensate crossover

L E C Rosales-Zárata<sup>1</sup> and R Jáuregui

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apdo. Postal 20-364, México DF 01000, Mexico  
E-mail: [laura@fisica.unam.mx](mailto:laura@fisica.unam.mx) and [rocio@fisica.unam.mx](mailto:rocio@fisica.unam.mx)

*New Journal of Physics* **12** (2010) 000000 (10pp)

Received 5 January 2010

Published xxx

Online at <http://www.njp.org/>

doi:10.1088/1367-2630/12/3/000000

**Abstract.** We study the virial relations for ultracold trapped two-component Fermi gases in the case of short finite range interactions. Numerical verifications for such relations are reported through the Bardeen–Cooper–Schrieffer (BCS) Bose–Einstein-condensate (BEC) crossover. As an intermediate step, it is necessary to evaluate the partial derivatives of the many-body energy with respect to the inverse of the scattering length and with respect to the interaction range. Once the binding energy of the formed molecules in the BEC side is subtracted, the corresponding energy derivatives are found to have extreme values at the unitary limit. The value of the derivative with respect to the potential range in that limit is large enough to yield measurable differences between the total energy and twice the trapping energy unless the interacting system is described by extremely short potential ranges. The virial results are used to check the quality of the variational wavefunction involved in the calculations.

<sup>1</sup> Authors to whom any correspondence should be addressed.

## Contents

<b>1. Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2. Virial relations for a short-range potential</b>	<b>3</b>
<b>3. Approximate wavefunctions for the ground state of an ultracold Fermi gas</b>	<b>5</b>
<b>4. Numerical results for virial relations</b>	<b>5</b>
<b>5. Conclusions</b>	<b>9</b>
<b>Acknowledgments</b>	<b>9</b>
<b>References</b>	<b>9</b>

## 1. Introduction

In the absence of interaction, the virial theorem relates the energy per particle of a confined atomic gas with the trapping potential. If that potential is harmonic, the theorem states that the total energy per particle is twice the mean trapping potential energy

$$E = 2E_{\text{tr}}. \quad (1)$$

For strongly interacting two-component Fermi gases, confined by a harmonic trap in the unitary limit, this relation was also shown to be valid experimentally and theoretically [1, 2]. The first derivation of that theorem considered zero-range interactions and made use of the local density approximation. Further insight into the fundamental basis of this relation revealed several remarkable features of the unitary gas such as its scaling properties [3] or a mapping, using group theory, between the trapped and the free space problem [4]. Recently, the Hellmann–Feynman theorem was used to prove equation (1) at the unitary limit [5, 6] and to generalize the virial relations for finite scattering lengths [7, 8]. The physical origin of these relations lies in the variational stability imposed by the Schrödinger equation to the energy and states under small independent changes of the parameters that define the Hamiltonian that models the system.

Although nonzero range interactions would arise in any first principles description of ultracold interacting particles when the range of the interparticle interaction is smaller than all the length scales in the system, the details of the interaction are believed to be unnecessary and the parameters defining contact pseudo-potentials, like the scattering length, are expected to be sufficient to characterize the system. The importance of this asseveration deserves a detailed study of the dependence of the predicted properties of an ultracold dilute gas on the parameters that define short finite range interactions. For general confinement potentials and finite range interactions, a general virial theorem has been stated as follows in [8]:

Consider a Hamiltonian for a system of  $N$  particles with arbitrary statistics:

$$H = H' + U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (2)$$

where  $H'$  and its domain depend on  $p$  parameters with length dimensions  $\ell_1, \dots, \ell_p$ , on  $\hbar$  and on the mass of the particles.  $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  denotes a regular arbitrary function that allows the domains of  $H$  and  $H'$  to coincide, where  $\vec{r}_i$  is the position vector for the  $i$ th particle.

Then,

$$E = \left\langle U + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \nabla_{\vec{r}_i} U \right\rangle - \frac{1}{2} \sum_{q=1}^p \ell_q \frac{\partial E}{\partial \ell_q} \quad (3)$$

with  $E$  being the total energy.

For  $N$  particles confined by a harmonic trap,  $U = \sum_i^N m(\omega_x^2|x_i|^2 + \omega_y^2|y_i|^2 + \omega_z^2|z_i|^2)/2$  and (3) becomes

$$E = 2E_{\text{tr}} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^p \ell_s \frac{\partial E}{\partial \ell_s}, \quad (4)$$

where  $E_{\text{tr}} = \langle U \rangle$  is the trapping potential energy.

## 2. Virial relations for a short-range potential

In the present paper, we study  $2N$  fermionic atoms of mass  $m$  in two equally populated hyperfine states ( $N = N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 165$ ) confined by an isotropic three-dimensional harmonic trap of frequency  $\omega$ , and interacting through an attractive finite range potential  $V = -|V_0|e^{-r/r_v}$ . This potential is characterized by two parameters, its strength  $V_0$  and its range  $r_v$ . When the kinetic energy of the atoms is low enough, the scattering length is a proper parameter to describe the interacting system. For a given number of s-wave bound states and a given  $r_v$ , there is a one-to-one relationship between the strength of the potential  $V_0$  and the scattering length  $a$ . We consider the case where at most one bound state is admitted by the potential and find the ground state of the many-body Schrödinger equation approximately, via a variational Monte Carlo calculation, for several scattering lengths  $a$  and short potential ranges  $r_v \ll r_{\text{ho}} \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$ . We then study the behavior of the total, internal and trapping energies as a function of both the length parameters  $a$  and  $r_v$  to verify (4). The explicit expression of the Hamiltonian is

$$H = \sum_{i,j=1}^N \frac{p_{\uparrow i}^2 + p_{\downarrow j}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (r_{\uparrow i}^2 + r_{\downarrow j}^2) + \sum_{i,j} V_{\uparrow i \downarrow j} \quad (5)$$

and the corresponding virial relation becomes

$$E = 2E_{\text{tr}} - \frac{r_v}{2} \frac{\partial E}{\partial r_v} \Big|_{a=\text{constant}} - \frac{a}{2} \frac{\partial E}{\partial a} \Big|_{r_v=\text{constant}}, \quad (6)$$

$$= 2E_{\text{tr}} - \frac{r_v}{2} \frac{\partial E}{\partial r_v} \Big|_{a=\text{constant}} + \frac{1}{2a} \frac{\partial E}{\partial (1/a)} \Big|_{r_v=\text{constant}}. \quad (7)$$

On the BEC side of the crossover, the total energy  $E$  can become extremely large compared to the total energy  $E$  on the BCS side due to the contribution of the binding energy of the formed molecules. This fact increases the numerical errors in the evaluation of the derivatives in (7). In order to isolate this two-body effect from many-body effects, we have found it convenient to take into account the behavior of the free space binding energy as follows. The two-body problem,

$$\left[ \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \right] \tilde{\varphi}(\mathbf{r}) = \varepsilon \tilde{\varphi}(\mathbf{r}), \quad \mu = m/2, \quad (8)$$

is analytically solvable for s-states, so that the scattering length is explicitly given by

$$\begin{aligned} a &= r_v \eta(\zeta) \\ &= -2r_v \left[ \frac{\pi N_0(\zeta)}{2 J_0(\zeta)} - \ln(\zeta/2) - C \right], \end{aligned} \quad (9)$$

with  $\zeta = (2r_v \sqrt{|V_0| m / \hbar})$ ,  $C = 0.577 215 664 901 \dots$  is the Euler constant and  $J_\nu$  and  $N_\nu$  represent the Bessel functions of the first and second kinds of order  $\nu$ , respectively. This problem has the following bound states:

$$\tilde{\varphi}(r) = \mathcal{N} J_{2r_v \sqrt{|\varepsilon_s^{(r_v)}| m / \hbar}}(y), \quad (10)$$

where  $\mathcal{N}$  is a normalization factor and  $y = \zeta e^{-r/2r_v}$ . The boundary condition at the origin implies  $J_{x_s}(\zeta) = 0$ , so the corresponding eigenenergies  $\varepsilon_s^{(r_v)}$  fulfil the equation

$$2r_v \sqrt{|\varepsilon_s^{(r_v)}| m / \hbar} = x_s. \quad (11)$$

That is,  $x_s$  is determined by  $\zeta$  and

$$\varepsilon_s^{(r_v)} = -\frac{(\hbar x_s)^2}{4mr_v^2}. \quad (12)$$

We shall work with  $z_0 < \zeta < z_1$  with  $z_0$  and  $z_1$  being the first two zeros of the Bessel function  $J_0$ . Under these conditions, just one bound state is admitted for each positive scattering length  $a$ . Given  $a$  and  $r_v$  and using (9), we can write

$$x_0 = x_0(\zeta) = x_0\left(\eta^{-1}\left(\frac{a}{r_v}\right)\right) \equiv w\left(\frac{a}{r_v}\right). \quad (13)$$

As a consequence, the ground-state binding energy  $\varepsilon_0^{(r_v)}$  of the two interacting particle system in otherwise free space satisfies the equation

$$\begin{aligned} r_v \frac{\partial \varepsilon_0^{(r_v)}}{\partial r_v} \Big|_{a=\text{constant}} &= -2\varepsilon_0^{(r_v)} - 2 \frac{\varepsilon_0^{(r_v)} w'(a/r_v) a}{x_0 r_v} \\ &= -2\varepsilon_0^{(r_v)} - a \frac{\partial \varepsilon_0^{(r_v)}}{\partial a} \Big|_{r_v=\text{constant}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Thus, if we define

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \frac{E}{2N}, \quad \text{if } a < 0, \\ &= \frac{E}{2N} - \frac{\varepsilon_0^{(r_v)}}{2}, \quad \text{if } a > 0 \end{aligned} \quad (15)$$

and

$$\langle m\omega^2 R^2 \rangle = \left\langle \frac{\sum_i^N m\omega(|r_{\uparrow i}|^2 + |r_{\downarrow i}|^2)}{2N} \right\rangle, \quad (16)$$

the virial relation, equation (7), reads

$$\langle m\omega^2 R^2 \rangle = \tilde{E} + \frac{r_v}{2} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial r_v} \Big|_{a=\text{constant}} - \frac{1}{2a} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial (1/a)} \Big|_{r_v=\text{constant}}. \quad (17)$$

This expression is more easy to verify numerically than (7). Note that, from a dimensional analysis, equations similar to (13) can be expected to be valid for other forms of the potential.

### 3. Approximate wavefunctions for the ground state of an ultracold Fermi gas

Approximate ground-state eigenfunctions for the Hamiltonian (5) were obtained variationally. The trial wavefunctions used have the Eagles–Leggett form

$$\Psi_{\lambda_{\text{EL}}} = \mathcal{A}_{\uparrow} \mathcal{A}_{\downarrow} [\phi(1_{\uparrow}, 1_{\downarrow}) \phi(2_{\uparrow}, 2_{\downarrow}) \dots \phi(N_{\uparrow}, N_{\downarrow})] \quad (18)$$

through the BCS-BEC crossover regime. In this equation,  $\mathcal{A}$  denotes the antisymmetrizing operator to be applied to all fermions of each species and, as a contrast to the unrestricted Eagles–Leggett formalism, we take the form of the paired functions as

$$\phi(\mathbf{r}_{i\uparrow}, \mathbf{r}_{j\downarrow}) \cong \varphi(r_{i,j}) e^{-\lambda_{\text{EL}} |\mathbf{r}_{i\uparrow} + \mathbf{r}_{j\downarrow}|^2/4}, \quad (19)$$

where  $\varphi(r_{ij})$  is the s-wave ground-state solution of the trapped interacting two-body problem

$$\left[ \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + V(r) \right] \varphi(r) = \varepsilon \varphi(r). \quad (20)$$

The variational parameter  $\lambda_{\text{EL}}$  modulates the optimal shape of the atomic cloud. The evaluation of the mean value of the many-body Hamiltonian, equation (5), for the restricted Eagles–Leggett trial wavefunction was done using Monte Carlo techniques that take advantage of the structure of the function [10].

For weak interactions, that is, for negative scattering lengths shorter than the mean separation between interacting atoms, lower variational energies are obtained using the length-scaled ground-state solution of the non-interacting problem (which is a product of Slater determinants) multiplied by a Jastrow correlation function

$$\Psi_{\beta, \lambda_J} = F_{\lambda_J}^J \mathcal{A}_{\uparrow} \prod_{i=1, N} \phi_{\mathbf{n}_{\uparrow i}}^{\text{ho}}(\beta \mathbf{r}_{\uparrow i}) \mathcal{A}_{\downarrow} \prod_{i=1, N} \phi_{\mathbf{n}_{\downarrow i}}^{\text{ho}}(\beta \mathbf{r}_{\downarrow i}), \quad (21)$$

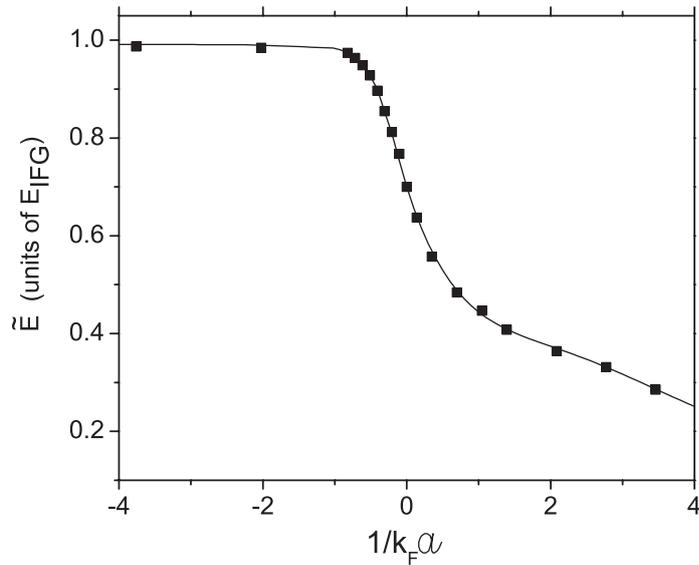
$$F_{\lambda_J}^J = \exp \left[ -\lambda_J \sum_{i_{\uparrow}, j_{\downarrow}} V(|\mathbf{r}_{i_{\uparrow}} - \mathbf{r}_{j_{\downarrow}}|) \right]. \quad (22)$$

The scaling factors  $\beta$  and  $\lambda_J$  were taken as variational parameters. For the many-body ground-state calculation, the inputs of the Slater determinants are the single-particle eigenstates of the non-interacting trapped system  $\phi_{\mathbf{n}}^{\text{ho}}$ , and the set of quantum numbers  $\{\mathbf{n}\}$  are chosen to give the lowest energy compatible with Pauli's exclusion principle. The Fermi energy  $\epsilon_F$  for  $\beta = 1$  defines an effective Fermi wavenumber  $k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}/\hbar$ , whose inverse provides a natural unit for measuring the scattering length and potential range in the interacting many-body problem.

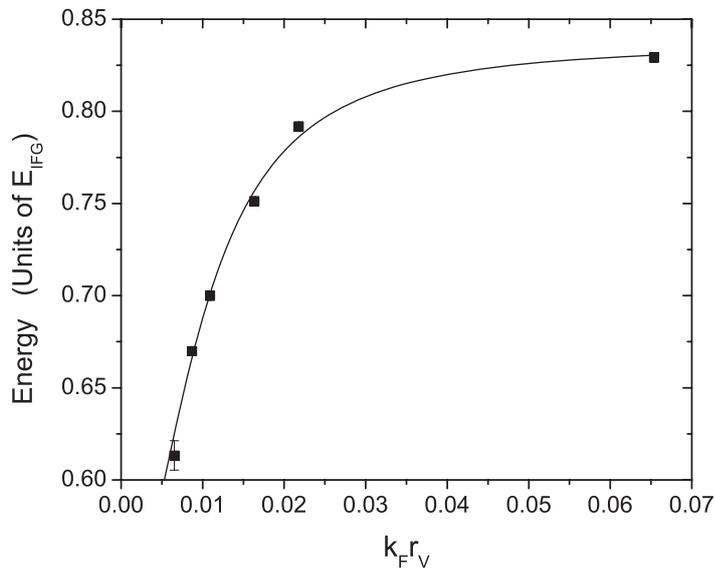
### 4. Numerical results for virial relations

In this paper, we concentrate on potential ranges in the interval  $k_F r_v \in [0.0087, 0.075]$ .<sup>2</sup> For each  $r_v$  and several scattering lengths through the crossover, upper bounds of the energy  $\tilde{E}$  were obtained by optimizing the variational parameters  $\lambda_{\text{EL}}$  or  $\lambda_J$  and  $\beta$  according to the trial wavefunction. The optimization of the numerical subroutines allowed us to explore higher

<sup>2</sup> To our knowledge, similar previous quantum Monte Carlo calculations with the shortest up to now finite range potentials and  $N \geq 10$  considers  $k_F r_v = 0.03$  both for non-trapped atoms (in Astrakharchik *et al* [11]) and trapped atoms (in von Stecher *et al* [11]).

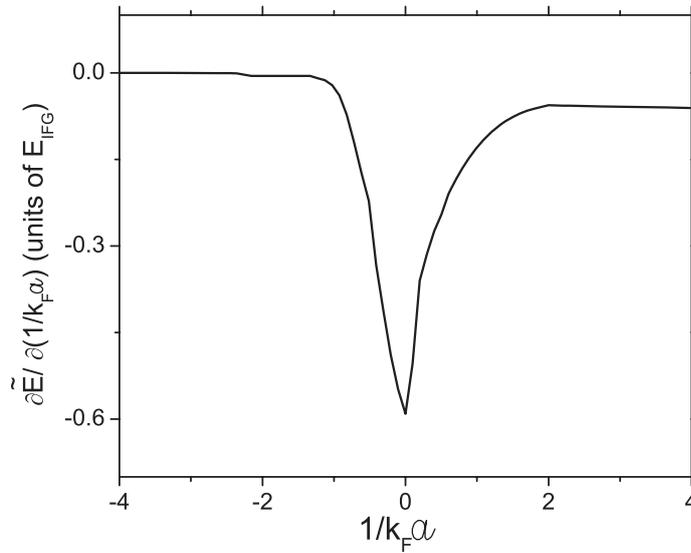


**Figure 1.** Many-body energy per particle,  $\tilde{E}$ , equation (15), as a function of the inverse of the scattering length for a potential range  $k_F r_v = 0.0109$ . The energy units correspond to  $E_{\text{IFG}}$ , the total energy per particle of the non-interacting atomic cloud, and  $k_F$  denotes the Fermi wavenumber.

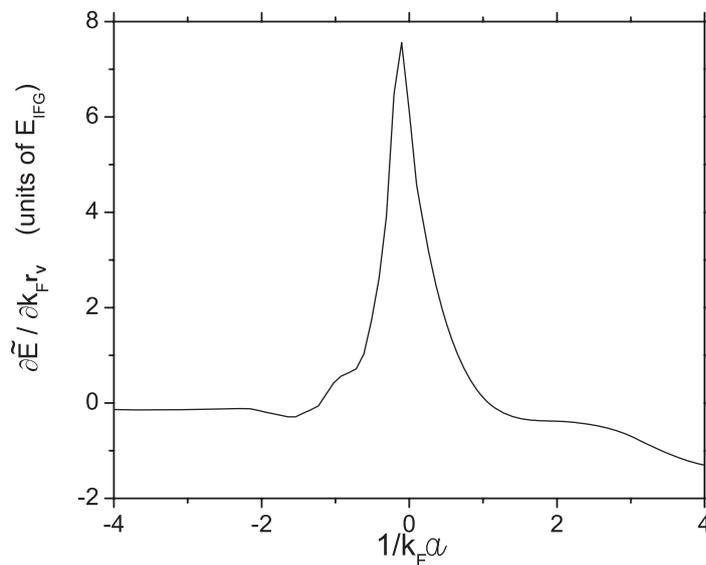


**Figure 2.** Many-body energy per particle,  $E$ , as a function of the potential range  $r_v$  at unitarity,  $1/k_F a = 0$ . The energy units correspond to  $E_{\text{IFG}}$ , the total energy per particle of the non-interacting atomic cloud, and  $k_F$  denotes the Fermi wavenumber. Note that at unitarity,  $E = \tilde{E}$ .

statistics with respect to previous calculations [9] and yield the evaluation of the energy with improved accuracy. In figures 1 and 2, we illustrate the obtained energies; the vertical size of the plotted points is comparable to or higher than the numerical errors. Note that the resulting curves for the energy dependence on the scattering length for a given range and on the range

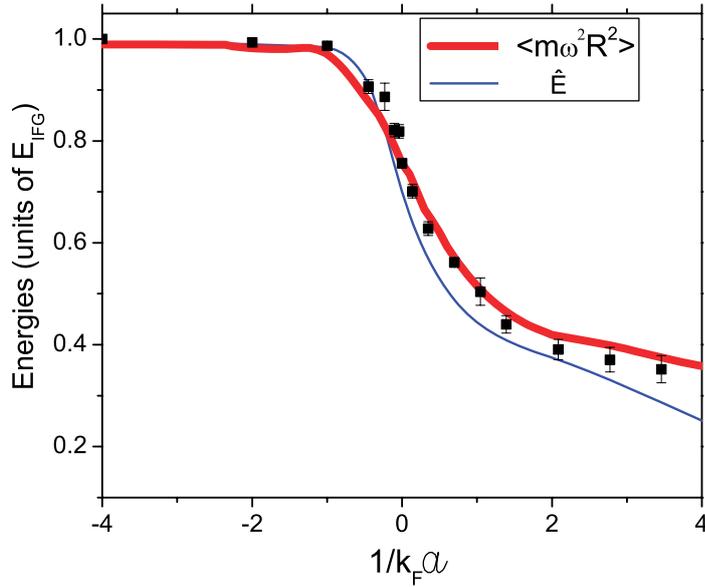


**Figure 3.** Partial derivative of the many-body energy per particle,  $\tilde{E}$ , equation (15), with respect to the inverse of the scattering length as a function of the inverse of the scattering length for a potential range  $k_F r_v = 0.0109$ . The energy units correspond to  $E_{\text{IFG}}$ , the total energy per particle of the non-interacting atomic cloud, and  $k_F$  denotes the Fermi wavenumber.



**Figure 4.** Partial derivative of the many-body energy per particle,  $\tilde{E}$ , with respect to  $k_F r_v$  as a function of the inverse of the scattering length for a potential range  $k_F r_v = 0.0109$ . The energy units correspond to  $E_{\text{IFG}}$ , the total energy per particle of the non-interacting atomic cloud, and  $k_F$  denotes the Fermi wavenumber.

for a given scattering length show a soft structure that allows a numerical interpolation or even an analytical local fitting curve. These interpolations were used to numerically compute the derivatives necessary to verify the virial relations. The results are illustrated in figures 3 and 4.



**Figure 5.** Softened curves for the many-body energy per particle,  $\tilde{E}$ , and the mean value of twice the trapping energy  $\langle m\omega^2 R^2 \rangle$  as predicted by the virial relation, equation (17). The dots represent the value of the trapping energy obtained directly from the variational wavefunctions. The energy units correspond to  $E_{\text{IFG}}$ , the total energy per particle of the non-interacting atomic cloud;  $k_{\text{F}}$  denotes the Fermi wavenumber.

For all the short interaction ranges explored, both derivatives,  $\partial \tilde{E} / \partial (1/k_{\text{F}}a)$  and  $\partial \tilde{E} / \partial (k_{\text{F}}r_{\text{v}})$ , get an extreme value at unitarity.

In figure 5, we show a comparison between the trapping energy curve as predicted by the virial relation, equation (17), and specific values of that energy evaluated directly from the variational functions for a potential range  $k_{\text{F}}r_{\text{v}} = 0.0109$ . Note that there is a good overlap between variational and virial results all over the crossover. The width of the continuous curve corresponds to the numerical errors in its derivation. The main source of error for the trapping energies evaluated directly from the variational wavefunctions results from the non-uniqueness of the variational parameters  $\lambda_{\text{EL}}$  and  $\beta$  that yield similar variational energies. In fact, the agreement between the trapping energies evaluated directly and using the virial relation can be used as an additional criterion to select those parameters. As a reference, in figure 5, the many-body energy curve  $\tilde{E}(1/k_{\text{F}}a)$  is also shown. The crossing of virial  $\langle m\omega^2 R^2 \rangle$  and total energy  $\tilde{E}$  curves does not occur at unitarity as a finite range effect. For a lower potential range,  $k_{\text{F}}r_{\text{v}} = 0.0087$ , we have verified that twice the trapping energy is closer to the total energy at the unitary limit. Q1

Although, in this paper, we report the results for  $N = 165$ , we have verified that similar results are obtained for  $N = 120, 84$  and  $56$  particles. That is, independently of the number of particles we considered, it was found necessary to take into account finite range effects to satisfy virial relations within numerical accuracy for potential ranges  $k_{\text{F}}r_{\text{v}} \geq 0.0087$ .

The energy at unitarity as a function of the potential range  $r_{\text{v}}$  can be used to estimate the parameter  $\xi = 1 + \beta_{\text{Berscht}}$ , which is expected to be a universal number for  $r_{\text{v}} \rightarrow 0$ . For a harmonically trapped system,  $\xi$  is given in terms of the ratio between the total energy per particle

$E$  and the total energy per particle of the analogous ideal trapped system  $E_{\text{IFG}}$  by  $\xi = (E/E_{\text{IFG}})^2$ . In the past years, there has been a great deal of effort in the community to calculate this parameter [12]. It was found that those calculations performed with lower ratios between the effective range and the interparticle spacing gave lower values of  $\xi$ . For  $k_{\text{F}}r_{\text{v}} = 0.0065$ , we obtained a strict upper bound to the energy, yielding  $\xi = 0.376 \pm 0.008$ . If the interpolation curves for the energy at unitarity as a function of the potential range  $r_{\text{v}}$ , figure 2, are used to extrapolate to the zero range limit the value of the ratio  $E/E_{\text{IFG}}$ , then slight variations of the interpolation curves compatible with errors of the calculated energies will yield different limiting values of  $E/E_{\text{IFG}}$  at  $r_{\text{v}} = 0$ . Using this procedure, we have obtained that  $E/E_{\text{IFG}}(r_{\text{v}} = 0)$  is in the interval [0.470, 0.498], so that the homogeneous gas parameter  $\xi$  would be in the interval [0.221, 0.248]. However, numerical improvements should be made to support further this extrapolated result.

## 5. Conclusions

We have studied the virial relations for trapped particles interacting through a two-parameter (intensity and potential range) attractive potential. We have applied those relations to the study of the ground state of a balanced mixture of two species fermionic trapped atoms when the wavefunction is approximately obtained using simple form variational trial functions. In this way, we are able to quantify the quality of our wavefunctions and, even more important, we can compare the virial relations of short finite range interaction versus contact interactions. Along the calculations, the partial derivatives of the energy  $\tilde{E}$  as a function of the scattering length and of the potential range were numerically evaluated. It was found that in all the cases considered, those derivatives get large values at unitarity. As a consequence, an accurate determination of the coefficient  $\tilde{E}/E_{\text{IFG}}$  at unitarity using finite range potentials requires an accurate extrapolation procedure. In a similar way, an accurate experimental determination of such a coefficient does require an extremely precise realization of the  $1/k_{\text{F}}a \rightarrow 0$  limit.

## Acknowledgments

LRZ acknowledges the financial support from CONACYT through grant no. 191877 and from the DGAPA-UNAM project IN-111109. LRZ thanks Carlos López-Natarén from the computing technical secretariat at Instituto de Física, UNAM, for his technical support during this work.

## References

- [1] Thomas J E, Kinast J and Turlapov A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 120402
- [2] Hui H, Drummond P D and Liu X-L 2007 *Nat. Phys.* **3** 469–72
- [3] Werner F and Castin Y 2006 *Phys. Rev. A* **74** 053604
- [4] Mehen T 2008 *Phys. Rev. A* **78** 013614
- [5] Son D T 2007 Three comments on the Fermi gas at unitarity in a harmonic trap arXiv:0707.1851v1
- [6] Thomas J E 2008 *Phys. Rev. A* **78** 013630
- [7] Tan S 2008 *Ann. Phys.* **323** 2987
- [8] Werner F 2008 *Phys. Rev. A* **78** 025601
- [9] Jáuregui R, Paredes R and Toledo Sánchez G 2007 *Phys. Rev. A* **76** 011604

Q2

- [10] Jáuregui R, Paredes R, Rosales-Zárate L and Toledo Sánchez G 2008 Simulation of an inhomogeneous Fermi gas through the BCS–BEC crossover arXiv:0803.0559  
Jáuregui R, Paredes R, Rosales-Zárate L and Toledo Sánchez G 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 065301
- [11] Astrakharchik G E, Boronat J, Casulleras J and Giorgini S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 200404  
von Stecher J, Green C H and Blume D 2008 *Phys. Rev. A* **77** 043619
- [12] Carlson J, Chang S Y, Pandharipande V R and Schmidt K E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **91** 050401  
Astrakharchik G E, Boronat J, Casulleras J and Giorgini S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 200404  
Dean L 2006 *Phys. Rev. B* **73** 115112  
Juillet O 2007 *New J. Phys.* **9** 163  
Blume D, von Stecher J and Green C H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 233201  
Dean L 2008 *Phys. Rev. C* **78** 024001  
Alexandros G and Carlson J 2008 *Phys. Rev. C* **77** 032801  
Alexandros G, Gandolfi S, Schmidt K E and Carlson J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 060403