



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DECOHERENCIA EN REDES ÓPTICAS
UNIDIMENSIONALES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

F Í S I C O

P R E S E N T A:

ARIEL AYALA RAMÍREZ



DIRECTOR DE TESIS: DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ

2011



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.

1. Datos del alumno

Ayala
Ramírez
Ariel
55 49 64 00
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
097155135

2. Datos del tutor

Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

3. Datos del sinodal 1

Dra.
Vicenta
Sánchez
Morales

4. Datos del sinodal 2

Dr.
Pablo
Barberis
Blostein

5. Datos del sinodal 3

Dr.
David Philip
Sanders

6. Datos del sinodal 4

Dr.
Alfred Barry
U'ren
Cortes

7. Datos del trabajo escrito

Decoherencia en redes ópticas unidimensionales
125 p.
2011

Índice general

Introducción	4
1. Hamiltoniano efectivo para potenciales de n pozos en una dimensión	11
1.1. Interacción a bajas energías	12
1.1.1. Dispersión de dos cuerpos	13
1.2. Potenciales dipolares	23
1.3. Descripción cuántica de un líquido de Bose en potenciales unidimensionales	
finitos	25
1.4. El Hamiltoniano efectivo para el caso de 2, 3 y 4 pozos	33
2. Análisis dinámico y estados estacionarios intrínsecos de la población de partículas en un potencial de n pozos	38
2.1. La dinámica del sistema	39
2.2. Población de partículas en los eigenestados del sistema	45
3. Decoherencia intrínseca en un potencial de n pozos	50
Conclusiones	54
A. Condensación de Bose-Einstein. Formulación teórica y ob-	

tención experimental	58
A.1. La termodinámica de un gas de bosones en una trampa armónica	59
A.2. Técnicas de enfriamiento láser	66
A.2.1. Enfriamiento Doppler	67
A.2.2. Enfriamiento por gradiente de polarización	68
A.2.3. Enfriamiento Raman	71
A.2.4. Enfriamiento por evaporación	72
A.3. Trampas para confinar átomos neutros	73
 Programa 1	 76
 Programa 2	 94
 Programa 3	 103
 Bibliografía	 118
 Bibliografía	 118

Introducción

Como es bien sabido, el comportamiento cuántico colectivo de la materia se exhibe a medida que la temperatura disminuye; ejemplo de ello son los gases atómicos ultrafríos, cuya fenomenología se encuentra determinada por el tipo de átomos que los componen: fermiones o bosones, que son los dos únicos tipos de partículas que existen en la naturaleza. Los bosones tienen espín entero (o, equivalentemente, una función de onda simétrica), por lo que pueden ocupar el mismo estado cuántico, es decir, no cumplen el principio de exclusión de Pauli. Los fermiones tienen un espín semientero (función de onda antisimétrica) y no pueden ocupar el mismo estado cuántico, es decir, satisfacen el principio de exclusión de Pauli. Protones, electrones y neutrones son fermiones, mientras que los fotones son bosones. En el caso de átomos, si la suma de protones, electrones y neutrones del átomo es impar, el átomo es un fermión, mientras que si es par es un bosón. Esta diferencia da lugar a un comportamiento completamente distinto cuando un conjunto macroscópico de átomos es enfriado lo suficiente.

En la década de los veinte del siglo pasado, Satyendra Nath Bose estableció las reglas estadísticas necesarias para obtener las propiedades termodinámicas de conjuntos grandes de fotones, que Albert Einstein generalizó para átomos bosónicos y son llamadas estadística de Bose-Einstein. Usando esta estadística, Einstein se dio cuenta que debajo de una temper-

atura crítica, la gran mayoría de los átomos de un gas de bosones poblarían el estado de más baja energía volviéndose indistinguibles unos de otros y, como consecuencia, el sistema se encontraría en un estado de coherencia cuántica macroscópico. Al fenómeno descrito se le conoce por el nombre de condensado de Bose-Einstein por analogía con la condensación de volumen que sufren los átomos en el paso de gas a líquido, sólo que en este caso, los átomos se condensan en un solo estado de energía.

Debido a las dificultades para alcanzar temperaturas suficientemente frías para producir la condensación y la falta de una trampa que confinara el gas, esta teoría no se comprobó experimentalmente hasta que en 1995 tres laboratorios de Estados Unidos produjeron paralelamente el condensado de Bose-Einstein [10] [11] [12]. Para esto, fue necesario aprovechar el efecto que tiene la interacción entre la radiación y la materia, y desarrollar técnicas con luz láser tales como el enfriamiento Doppler o el potencial por polarización, que permitieran obtener temperaturas necesarias para lograr el condensado, que se explican más a detalle en el apéndice A. Actualmente es posible conseguir condensados a muy baja densidad (10^7 átomos por centímetro cúbico) y temperatura (50 nK).

El logro del condensado de Bose-Einstein no sólo fue importante en sí mismo, sino por las posibilidades de estudio de nuevos fenómenos cuánticos macroscópicos que abrían un nuevo capítulo en la física atómica, tal como la observación de interferencia de dos condensados que se superponen [13], de coherencia con fase de rango largo [37] y de vértices cuantizados [16]. En todo caso, permanezca o no coherente, este sistema constituye una colección macroscópica de átomos que exhiben propiedades cuánticas.

En fechas recientes se han realizado diversos experimentos en los se usan como base los condensados de Bose, en éstos, la naturaleza intrínseca del

conjunto macroscópico de átomos ha puesto de manifiesto la existencia de fases cuánticas como función de las interacciones entre las partículas y de el potencial externo que las confina. Es importante mencionar que ambas propiedades son susceptibles de ser controladas externamente en forma experimental. Ejemplos del control y manipulación en este tipo de sistemas lo constituyen las así llamadas redes ópticas, que se forman al transferir el gas de Bose en su fase condensada a un potencial óptico formado por la superposición de ondas que se propagan en sentidos contrarios, dando como resultado final la existencia de conjuntos de átomos neutros distribuidos espacialmente en un arreglo con una simetría bien definida. En particular, en las referencias [7] [8] y [9] se han reportado arreglos en una, dos y tres dimensiones. En la Fig. 1 se ilustra en forma esquemática un gas confinado en una red óptica. En [7], se muestra que el sistema de bosones a bajas temperaturas puede transferirse a potenciales de una y dos dimensiones cuya coherencia puede estudiarse monitoreando el patrón de interferencia de las múltiples ondas de materia cuando se liberan los átomos del potencial. En [8], se realizó experimentalmente una red óptica en tres dimensiones, se observó la transición de fase del sistema de un estado coherente a uno con decoherencia en el que un número fijo de átomos se encuentra en cada pozo al variar la profundidad del pozo y se comprobó que en dicho estado se tiene una baja ocupación de átomos por sitio de red. En [9], esta misma transición fue encontrada pero en un sistema ligeramente distinto: un condensado de Bose transferido a un potencial óptico de dos pozos (junta de Josephson bosónica en un potencial de dos pozos) ¹. En particular, se determinó que

¹Una junta de Josephson es la interfase entre dos ondas macroscópicamente coherentes separadas por una barrera de manera que existe tunelaje entre ambas llamado efecto Josephson. El efecto Josephson ha sido observado en diferentes sistemas tales como dos superconductores separados por un aislante delgado o dos reservorios de superfluido separados por aberturas nanoscópicas.

la transición entre el estado superfluido o de oscilaciones coherentes al de aislante, ocurre como función de la concentración inicial de partículas en uno de los pozos, dejando inalteradas las interacciones naturales del sistema.

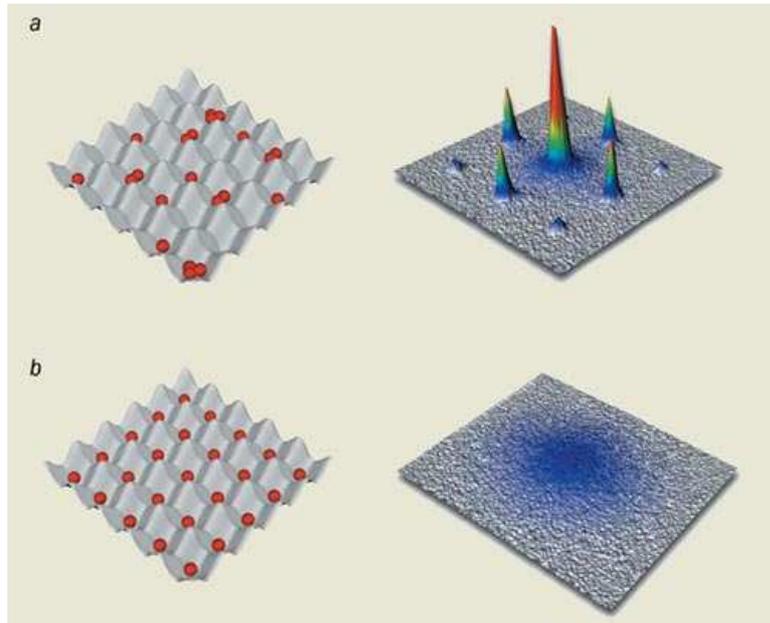


Figura 1: Trampa óptica en tres dimensiones. Se observa en forma esquemática las dos fases cuánticas opuestas; en (a) los átomos se encuentran libres y pueden moverse a cualquier sitio de la red, en (b) se muestra un aislante de Mott, donde los átomos están confinados uno por uno en cada sitio de la red. (Tomada de ??.)

Los experimentos arriba descritos son la motivación de esta tesis. En particular, el interés de este trabajo es describir la dinámica de sistemas de átomos bosónicos confinados en potenciales unidimensionales a muy bajas temperaturas como función de la interacción entre pares. Debido a que dichas interacciones dan lugar a que el sistema cerrado se relaje a un estado de equilibrio, se demostrará que dicho proceso es equivalente al fenómeno de decoherencia intrínseca.

Como ya se mencionó, varios experimentos con condensados de Bose-Einstein han mostrado una variedad de fenómenos como resultado del tipo de trampas en los que los átomos son confinados y de la magnitud de las

interacciones entre pares de partículas. Los primeros experimentos en este sentido mostraron dos regímenes extremos cuando el condensado se encuentra en una trampa óptica de dos o más pozos [14] [8]: el de oscilaciones coherentes llamado superfluido (o de oscilaciones de Rabi), cuando las interacciones pueden considerarse despreciables y el tunelaje entre los pozos puede controlarse variando la profundidad de los pozos, y el de decoherencia llamado “Mott *insulator*” (o de oscilaciones de Fock). El paso de un estado a otro se le conoce como transición superfluido-“Mott *insulator*”, debido a su parecido con las transiciones ya conocidas en superfluidos. Experimentos posteriores [15] [16] mostraron un tercer régimen en el que se observa que la evolución temporal del valor de expectación del número de partículas en cada pozo decae a un estado de equilibrio (es decir, pierde coherencia) y luego es seguido por “*revivals*” (recurrencias), en que el sistema vuelve a ganar coherencia por breves periodos. A éste tercer régimen se le llama de oscilaciones de Josephson [9].

Varios métodos teóricos han sido empleados para describir el tunelaje en condensados de Bose-Einstein confinados en potenciales ópticos; todos ellos se pueden agrupar dentro de dos distintos modelos: aproximaciones del campo medio (o aproximación semiclásica), que toma como punto de partida la ecuación de Gross-Pitaevskii [17] [18] y un tratamiento cuántico exacto basado en el Hamiltoniano de Bose-Hubbard [14] [19] [20]. La ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo asume que la única contribución importante al comportamiento del sistema se debe a los átomos del estado base, con lo cual se puede aproximar la función de onda por una función clásica. Considerando que dicha función puede descomponerse en tantos modos como pozos de potencial posee una red unidimensional, se obtiene un sistema de ecuaciones acopladas para los diferentes modos y se determina con

ello la población de partículas como función del tiempo. En contraparte, el Hamiltoniano del modelo de Bose-Hubbard se puede obtener análogamente al Hamiltoniano de Hubbard que describe electrones en sólidos, ya que las trampas ópticas usadas para confinar los bosones forman potenciales tipo redes cristalinas. Sin embargo, el Hamiltoniano que aquí se usa se deducirá de primeros principios aplicados al Hamiltoniano más general en segunda cuantización, que incluye interacciones entre pares de partículas. Con esto, se obtiene un Hamiltoniano con una expresión sencilla y que además es completamente cuántico.

El objetivo central de este trabajo es estudiar la coherencia de un sistema compuesto por un gas ultrafrío de bosones interactuantes confinado en un potencial unidimensional de 2, 3 y 4 pozos, respectivamente. Para esto, primeramente se analiza la dinámica del sistema calculando numéricamente el valor de expectación del número de partículas en cada pozo como función del tiempo, usando el Hamiltoniano descrito por el modelo de Bose-Hubbard adecuado a cada potencial. La evolución dinámica de las poblaciones se estudia utilizando la base de número y la base de eigenestados del Hamiltoniano. Dicho análisis describe bien la transición entre los tres regímenes existentes (oscilaciones de Rabi, Josephson y Fock) y revela que las transiciones dependen de la razón entre el tunelaje y la interacción entre partículas. Además, permite comprobar la existencia de un estado estacionario a lo largo de la transición, el cual coincide (en el caso de los eigenbases) con los estados estacionarios intrínsecos, es decir, con valores de expectación de la población en cada pozo en los eigenestados. Es importante mencionar que tanto el tiempo de relajación al estado de equilibrio como el tiempo de recurrencia (tiempo en el cual las poblaciones en cada pozo regresan al estado inicial) pueden inferirse estudiando la evolución de las poblaciones en los pozos para

tiempos suficientemente grandes. Una vez establecida la propiedad de equilibrio a través del estudio de propiedades de pocos cuerpos (en particular, la población de partículas), se estudia la decoherencia asociada al proceso de relajación de estos sistemas. Específicamente, se estudia la evolución de propiedades de un cuerpo por medio de la matriz de densidad reducida y se observa cómo estados iniciales arbitrarios tienden a relajarse a estados estacionarios incoherentes.

Este trabajo está organizado en 4 capítulos. En el capítulo 1, se hace una deducción de los Hamiltonianos efectivos para estudiar la dinámica de un gas ultrafrío de bosones en potenciales unidimensional de 2, 3 y 4 pozos. En el capítulo 2, se presentan los análisis de los resultados obtenidos. En el capítulo 3, se muestra que la coherencia del sistema también se ve reflejada en la evolución de la matriz de densidad reducida de un cuerpo. Finalmente, en el capítulo 4, se presentan las conclusiones y perspectivas de esta tesis.

Se incluye también un apéndice que sirve de transfondo para el trabajo con una breve descripción teórica de la formación de un condensado de Bose-Einstein usando Mecánica Estadística y de los mecanismos experimentales que se utilizan para su obtención.

Capítulo 1

Hamiltoniano efectivo para potenciales de n pozos en una dimensión

En este capítulo, se deducirán los Hamiltonianos efectivos que representan un gas de Bose con interacciones a bajas temperaturas, confinado en un potencial de n pozos ($n = 2, 3$ y 4). Para este propósito, en las dos primeras secciones se describirá el efecto de los dos potenciales a los que están sujetos los átomos que componen el gas de Bose ultrafrío, el potencial de interacción entre pares de partículas y el potencial de confinamiento debido a la radiación de láseres contrapuestos o, en otras palabras, el potencial de interacción originado por la presencia de un potencial externo compuesto de n pozos. Como se verá en el siguiente capítulo, ambos aspectos tienen consecuencias sobre la coherencia cuántica y determinan la evolución temporal de las poblaciones. Más importante aún, se puede establecer una dependencia cuantitativa entre los parámetros que representan la existencia de estos potenciales y la transición entre un régimen de oscilaciones coherentes a un

régimen de autoatrapamiento.

En la sección tres, se usará el conocimiento de las dos primeras secciones para derivar el Hamiltoniano efectivo que describe la dinámica de un gas de bosones ultrfrío confinado en un potencial unidimensional de n pozos usando el formalismo de la segunda cuantización y algunas hipótesis propias del sistema, lo que se conoce como el modelo de Bose-Hubbard. Para propósitos de ilustración, se detalla el caso de la deducción del Hamiltoniano para el caso de 3 pozos.

En la última sección de este capítulo, se escribirán explícitamente los Hamiltonianos para los casos de 2, 3 y 4 pozos, que son los casos a tratar en este trabajo.

1.1. Interacción a bajas energías

Las colisiones entre átomos a ultrabaja energía juegan un papel fundamental en la física de los gases ultrafríos, ya que las “buenas colisiones” (colisiones elásticas que conservan los estados internos) son fundamentales para realizar el enfriamiento por evaporación, lo que permite alcanzar las temperaturas necesarias para que se forme el condensado de Bose Einstein. Los efectos de las colisiones, sin embargo, van más allá de la producción del condensado; a pesar de las extremadamente bajas densidades a las que se encuentra el *ensemble* de partículas en el gas condensado, la aparentemente tenue interacción es responsable de una gran cantidad de sus comportamientos, incluyendo su evolución temporal.

1.1.1. Dispersión de dos cuerpos

A la temperatura típica de la vida diaria, la longitud de onda de De Broglie λ_{dB} de un átomo es de unas milésimas de nanómetro y las reacciones químicas de un gas son usualmente interpretadas como la interacción de partículas clásicas puntuales moviéndose en potenciales definidos por su distribución de carga electrónica asociada. En contraste, en el rango de temperatura en la cual ocurren el enfriamiento Doppler y el enfriamiento por gradiente de polarización (aproximadamente entre 1 mK y 1 μ K), llamado rango de colisiones frías, λ_{dB} se vuelve comparable o mayor que la longitud del enlace químico. Por debajo de 1 μ K, en que el enfriamiento por evaporación y la condensación de Bose Einstein tienen lugar, λ_{dB} crece ($\sim 1.9 \times 10^4$ el radio de Borh) hasta ser comparable con la distancia media de separación de los átomos (~ 10 el radio de Borh) en la densidad crítica del condensado de Bose Einstein. Las colisiones aquí ocurren en un rango de temperatura de 1 μ K \rightarrow 0, que es llamado de colisiones ultrafrías. Para que el sistema sea estable en la región ultrafría, la densidad del gas debe ser tan baja que colisiones de más de dos cuerpos son raras. Esto corresponde a una densidad de $10^{13} - 10^{15}$ átomos/ cm^3 ; para densidades más altas, los efectos de recombinación se vuelven importantes.

Al llegar al régimen ultrafrío, la longitud de onda De Broglie de las partículas del gas es del orden de micrómetros, con lo que dos efectos suceden: el primero es que las funciones de onda de los átomos individuales comienzan a superponerse y el *ensemble* completo entra en un régimen de degeneración cuántica, es decir, se forma el condensado. Por otro lado, el potencial de interacción W para dos partículas dispersadas tiene un impacto significativo sobre la función de onda de dispersión $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ a distancias mucho mayores que la clásica extensión del potencial de interacción, es decir,

$$|\mathbf{x}| = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \gg R_{int}, \quad (1.1)$$

donde R_{int} es rango de interacción efectivo del potencial (por ejemplo, para un potencial de Van der Waals que escala como $-\frac{C_6}{r^6}$, este rango corresponde a la longitud de Van der Waals $l_{vdW} = \frac{1}{2} (mC_6/\hbar^2)$).

Entonces, la dispersión ultrafría es sensible a la región asintótica del potencial (sin importar su forma), es decir, si el comportamiento asintótico de la dispersión es adecuadamente reproducido por colisiones de bajo momento ($\hbar k$)

$$\frac{2\pi}{\lambda_{dB}} = k \ll \frac{1}{R_{int}}, \quad (1.2)$$

los detalles del potencial de dispersión dentro de R_{int} no son importantes, con lo que puede considerarse que la colisión entre átomos tiene lugar de manera radial e isotrópica.

Para resolver el problema de dispersión de dos átomos formalmente, considérese la siguiente ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + W(x) \right] \psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

para el movimiento relativo de las dos partículas de masa m , con energía positiva (E) y masa reducida $M = m/2$. Aquí, el Hamiltoniano es la suma de la energía cinética de las partículas más su potencial de interacción $W(x)$ con $x = |\mathbf{x}|$, y \mathbf{x} en coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

Se busca una solución a esta ecuación en la región asintótica $r \gg R_{int}$. En esta región, la solución puede ser escrita como la suma de una onda plana ($W = 0$) incidente $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, más una onda dispersada que se expande hacia afuera desde $x = 0$, es decir, una función de onda con forma asintótica

$$\psi_{sc} = f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (1.4)$$

es decir, la solución puede ser escrita como

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \psi_{sc}, \quad (1.5)$$

donde

$$k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}, \quad (1.6)$$

y la función $f(\theta, \phi)$, que es el único término que depende del potencial, es llamada la amplitud de dispersión.

Debido a la simetría radial del potencial central, al escoger el vector de onda incidente alineado a z , $\mathbf{k} = kz$, la dispersión es independiente de ϕ , es decir, la amplitud de dispersión sólo depende de θ , $f(\theta)$ y la onda plana se escribe como e^{ikz} .

Entonces, para calcular la amplitud de dispersión, se debe expandir la función de onda con respecto a los valores l del momento angular entre las partículas

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \frac{\chi_{kl}(r)}{kr}, \quad (1.7)$$

donde $P_l(\cos\theta)$ son los polinomios de Legendre y las funciones radiales $\chi_{kl}(r)$ satisfacen la ecuación

$$\frac{d^2\chi_{kl}}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi_{kl} + \frac{2M}{\hbar^2}[E - W(x)]\chi_{kl}. \quad (1.8)$$

Cada valor l del momento angular es solución y todas las soluciones (llamadas ondas parciales) contribuyen a la dispersión. Sin embargo, a medida

que aumenta l , el término centrífugo $l(l+1)/r^2$ se vuelve cada vez más importante, por lo que la partícula incidente necesita una mayor energía cinética para sobrepasar la repulsión del término centrífugo. Por tanto, a bajas energías se espera que sólo unas cuantas ondas parciales afecten la dispersión en forma efectiva, es decir, se cumple la condición (1.2).

Para la condición de frontera a distancias grandes $r \gg R_{int}$, se puede despreciar la interacción, así como el término centrífugo en la Ec. (1.8), con lo cual se obtiene la ecuación de Schrödinger para la partícula libre cuya solución se escribe, en términos de las funciones esféricas de Bessel $j_l(kr)$ y las funciones de Neumann $n_l(kr)$, de la siguiente forma:

$$\chi_{kl}(r) = kr [B_l j_l(kr) + C_l n_l(kr)] . \quad (1.9)$$

Como el comportamiento asintótico de las funciones j_l y n_l es

$$j_l(kr) \longrightarrow \frac{1}{kr} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) , \quad (1.10)$$

y

$$n_l(kr) \longrightarrow -\frac{1}{kr} \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) , \quad (1.11)$$

cuando $r \rightarrow \infty$, la solución χ_{kl} cuando $r \gg R_{int}$ toma la forma

$$\chi_{kl}(r) = A_l \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) , \quad (1.12)$$

donde $A_l = [B_l^2 + C_l^2]^{1/2}$ y

$$\tan(\delta_l) = -\frac{C_l}{B_l} . \quad (1.13)$$

Las cantidades δ_l son los llamados corrimientos de fase y contienen toda la

información de la interacción, pues indican que a largas distancias el efecto de cualquier potencial sobre la onda dispersada es producir un corrimiento de fase δ_l en la onda esférica saliente.

Para conectar las ondas parciales con la onda dispersada (1.4), primero se expande la onda plana $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$ en términos de los polinomios de Legendre:

$$e^{ikz} = \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [e^{ikr} - e^{-(kr-\pi l)}] . \quad (1.14)$$

Escogiendo $A_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$ para cancelar el factor e^{-ikr} en la Ec. (1.5), se obtiene que la amplitud de dispersión es

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l}) , \quad (1.15)$$

o bien

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{i\delta_l} \sin \delta_l) . \quad (1.16)$$

Para calcular explícitamente los corrimientos de fase, se debe resolver la Ec. (1.8). La situación se simplifica para soluciones de baja energía que satisfacen la condición (1.2). Entonces, para distancias $r \ll 1/k$ se puede poner $E = 0$ en la Ec. (1.8). Además, como ya se discutió, para bajas energías sólo unas cuantos valores del momento angular l contribuyen a la dispersión; si la energía es suficientemente baja, las colisiones con $l > 0$ se anulan. Con esto, la Ec. (1.8) toma la forma

$$\frac{d^2 \chi_{k0}}{dr^2} - \frac{2M}{\hbar^2} W(x) \chi_{k0} = 0 . \quad (1.17)$$

La solución de (1.17) debe ser congruente con la forma asintótica de (1.8)

en la región

$$R_{int} \ll r \ll \frac{1}{k}, \quad (1.18)$$

de hecho, en este intervalo, tanto la Ec. (1.17) y la Ec. (1.8) son aplicables. En la región $r \gg R_{int}$ se puede ignorar el término del potencial de interacción en (1.17) y la solución toma la forma lineal

$$\chi_{k0} = c_0 (1 - \kappa r). \quad (1.19)$$

Por otro lado, si $kr \ll 1$, la Ec. (1.8) puede escribirse con la misma forma que (1.19) con $c_0 = e^{i\delta_0} \sin \delta_0$ y

$$\tan \delta_0 = -\frac{k}{\kappa}. \quad (1.20)$$

Definiendo la longitud de dispersión α_s mediante

$$\tan \delta_0 = -k\alpha_s, \quad (1.21)$$

entonces, en el límite de k pequeña, $k \rightarrow 0$, la longitud de dispersión y el primer corrimiento de fase se relacionan linealmente mediante la ecuación

$$\delta_0 = -k\alpha_s. \quad (1.22)$$

En conclusión, conforme $k \rightarrow 0$, sólo el término $l = 0$ sobrevive y la onda dispersada (1.4), que es llamada onda- s denotando el hecho de que el momento angular relativo entre partículas es cero, puede ser escrita como

$$\begin{aligned}\psi_{sc} &= f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \frac{\sin \delta_0}{kr} e^{i(kr + \delta_0)},\end{aligned}\tag{1.23}$$

que, tomando la aproximación para bajas energías, es

$$\psi_{sc} = -\frac{\alpha_s}{r} e^{ik(r - \alpha_s)}.\tag{1.24}$$

Es decir, para bajas energías, la amplitud de dispersión se vuelve constante, con lo que se puede pensar a las partículas como esferas clásicas duras de radio α_s , entonces, los detalles del potencial W pueden ser ignorados ya que toda la interacción se ve reflejada en la longitud de dispersión.

Para conocer el valor de la longitud de dispersión, considérense las transformadas de Fourier de la Ec. (1.3) y la solución (1.5) en una caja de volumen V :

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2M} \tilde{\psi}(k') + \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{W}(k' - k'') \tilde{\psi}(k'') = E_k \tilde{\psi}(k'),\tag{1.25}$$

$$\tilde{\psi}(k') = V \delta_{k,k'} + \tilde{\psi}_{sc}(k'),\tag{1.26}$$

sustituyendo la expresión (1.26) en la ecuación de Schrödinger (1.25) se obtiene una ecuación para $\tilde{\psi}_{sc}(k')$

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2 k'^2}{2M} \left(V \delta_{k,k'} + \tilde{\psi}_{sc}(k') \right) + \tilde{W}(k' - k) \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{W}(k' - k'') \tilde{\psi}_{sc}(k'') \\ &= E_k \left(V \delta_{k,k'} + \tilde{\psi}_{sc}(k') \right).\end{aligned}\tag{1.27}$$

Reemplazando la energía a través de la Ec. (1.6), la ecuación para la onda dispersada es:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2M} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2M} \right) \tilde{\psi}_{sc}(k') = \tilde{W}(k' - k) + \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{W}(k' - k'') \tilde{\psi}_{sc}(k'') . \quad (1.28)$$

Definiendo la matriz de dispersión T como la solución de la ecuación anterior, es decir,

$$\tilde{\psi}_{sc}(k') = \frac{1}{E_k - E_{k'} + i0^+} T(k', k; E_k) , \quad (1.29)$$

donde 0^+ asegura que sólo la onda saliente exista. Reescribiendo la Ec. (1.28) en términos de T

$$\begin{aligned} & T(k', k; E_k) \\ &= \tilde{W}(k' - k) + \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{W}(k' - k'') \frac{1}{E_k - E_{k'} + i0^+} T(k'', k; E_k) . \end{aligned} \quad (1.30)$$

Ésta es la llamada ecuación de Lippman-Scwinger.

Tomando la transformada de Fourier inversa de la Ec. (1.29)

$$\psi_{sc}(r) = \frac{1}{V} \sum_{k'} e^{ik'r} \frac{1}{E_k - E_{k'} + i0^+} T(k', k; E_k) . \quad (1.31)$$

Al tomar el límite termodinámico ($V \rightarrow \infty$), la suma se transforma en una integral, es decir,

$$\sum_{k'} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad (1.32)$$

$$V \longrightarrow \infty .$$

Con lo que se obtiene

$$\psi_{sc}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' e^{ik'r} \frac{1}{E_k - E_{k'} + i0^+} T(k', k; E_k) . \quad (1.33)$$

Considerando las colisiones a baja energía, $E_k \rightarrow 0$ y $k \rightarrow 0$, se puede asumir que dentro de la integral

$$T(k', k \rightarrow 0; E_k \rightarrow 0) \approx T(0, 0; 0) , \quad (1.34)$$

de manera que en el límite estricto de $k \rightarrow 0$ se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_{sc}(r) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' e^{ik'r} \frac{1}{E_k - E_{k'} + i0^+} T(k', k; E_k) \\ &\approx -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \int d^3k' \frac{e^{ik'r}}{k'^2} \\ &\approx -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2} T(0, 0; 0) \left(\frac{2\pi^2}{r} \right) \\ &= -\frac{m}{4\pi\hbar^2} T(0, 0; 0) \frac{1}{r} . \end{aligned} \quad (1.35)$$

Comparando este resultado con la Ec. (1.24) para ψ_{sc} , se tiene que

$$T(0, 0; 0) = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m} . \quad (1.36)$$

Regresando a la ecuación de Lippman-Schwinger (1.30) y tomando el

límite de bajas energías se obtiene que

$$T(0, 0; 0) = \tilde{W}(0) + \frac{1}{V} \sum_{k''} \tilde{W}(k'') \frac{1}{-E_{k''} + i0^+} T(k'', 0; 0), \quad (1.37)$$

que es una ecuación exacta que puede usarse para una aproximación con perturbaciones. A primer orden, se ignora el segundo término y se obtiene el resultado más común para las colisiones de baja energía:

$$T(0, 0; 0) \approx \tilde{W}(0), \quad (1.38)$$

es decir,

$$\tilde{W}(0) = \int d^3r W(x) \approx \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}. \quad (1.39)$$

La Ec. (1.39) muestra que el potencial puede reemplazarse por cualquier función de corto alcance en tanto su integración sea igual a g

$$g = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}, \quad (1.40)$$

en particular,

$$W(x) = g\delta(x), \quad (1.41)$$

siendo $\delta(x)$ la función delta de Dirac.

En efecto, puesto que la longitud de onda de De Broglie de las partículas se hace tan grande en el régimen ultrafrío, los átomos parecen estar chocando en todo momento, por lo que es suficiente un potencial con el menor alcance posible.

1.2. Potenciales dipolares

El modelo más sencillo para describir la acción de un potencial óptico confinante actuando sobre átomos neutros, es considerar que el átomo posee solamente dos niveles. Para describir dicha interacción se puede simplemente considerar el átomo como un oscilador clásico en interacción con un campo eléctrico clásico. Para esto se seguirá el artículo de Grimm, Weidemüller y Ovchinnikov [5].

Entonces, sea el campo eléctrico producido por la luz láser $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} + c.c.$ que induce un momento dipolar eléctrico $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$. Dado que el momento dipolar se relaciona con el campo eléctrico de la siguiente forma:

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}, \quad (1.42)$$

donde α es una polarizabilidad compleja que depende de la frecuencia ω , el potencial de interacción está dado por

$$-\frac{1}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I, \quad (1.43)$$

donde la intensidad de la luz es $I = 2\epsilon_0 c E^2$ y el factor $\frac{1}{2}$ es debido a que el momento dipolar no es permanente.

La energía potencial es entonces proporcional tanto a la intensidad como a la parte real de la polarizabilidad, la cual contiene la componente en fase de la oscilación dipolar, que es la responsable de la dispersión. Puesto que la fuerza es conservativa, basta sacar el gradiente del potencial

$$\mathbf{F}(r) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I, \quad (1.44)$$

es decir, la fuerza es proporcional al gradiente de la intensidad.

Si se considera la luz del láser como un flujo de fotones con energía $\hbar\omega$, la velocidad de dispersión se puede escribir como

$$\Gamma_{dis} = \frac{P}{\hbar\omega} = \frac{\dot{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}}{\hbar\omega} = \frac{1}{\hbar\epsilon_0 c} \text{Im}g(\alpha) I, \quad (1.45)$$

donde P es la potencia absorbida por el átomo del campo, que es proporcional a la parte imaginaria de la polarizabilidad, que describe la parte fuera de fase de la oscilación dipolar.

Si se considera el átomo dentro del modelo de oscilador clásico de Lorentz, se puede mostrar [6] que la polarización puede escribirse en términos de la velocidad de amortiguamiento en resonancia Γ :

$$\alpha = 6\pi\epsilon_0 c^2 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\omega^3/\omega_0^2)} \Gamma. \quad (1.46)$$

Con esta expresión, el potencial y la velocidad de dispersión quedan explícitamente escritos de la siguiente forma:

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}), \quad (1.47)$$

$$\Gamma_{dis}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right)^2 I(\mathbf{r}). \quad (1.48)$$

Se observa que en resonancia $\omega = \pm\omega_0$ no tiene sentido hablar de un potencial dipolar. Sin embargo, experimentalmente los láseres son sintonizados cerca de la resonancia de manera que se puede suponer $\frac{\omega}{\omega_0} \approx 1$ y $|\omega - \omega_0| = \Delta \ll \omega_0$, con lo cual, las expresiones para el potencial y la dispersión se reducen a

$$U(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(\mathbf{r}), \quad (1.49)$$

$$\Gamma_{dis}(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\Delta}\right)^2 I(\mathbf{r}) . \quad (1.50)$$

De la Ec. (1.48) se observa que si $\Delta < 0$ (desintonización roja), el potencial dipolar es negativo y el campo atrae a los átomos. Por tanto, los mínimos de potencial se encuentran en las posiciones de máxima intensidad. Para el caso de $\Delta > 0$ (desintonización azul), el potencial es positivo y el campo repele a los átomos. Los mínimos de potencial se corresponden con los mínimos de intensidad.

Por otro lado, la velocidad de dispersión va como I/Δ^2 , mientras que el potencial va como I/Δ . Basta entonces trabajar con frecuencias suficientemente desintonizadas para reducir la dispersión mientras se mantiene un trampa razonablemente profunda, dos de los criterios importantes para el diseño de trampas.

1.3. Descripción cuántica de un líquido de Bose en potenciales unidimensionales finitos

Una vez conocida la interacción entre dos pares de partículas y el efecto del potencial de confinamiento externo sobre los átomos a muy bajas energías, se puede conocer la dinámica del gas deduciendo, de primeros principios, el Hamiltoniano que describe dichos sistemas, siendo éste un tratamiento cuántico completo.

Sea, entonces, un gas de bosones confinado en un potencial unidimensional formado por la interferencia de dos haces de láseres desintonizados, de manera que la interferencia forma n pozos de potencial con paredes finitas y con

simetría en el origen. Puesto que el *ensemble* de bosones se encuentra en un potencial óptico, se puede asumir que el gas se encuentra suficientemente frío y diluido como para que la interacción W entre ellos se encuentre descrita por la Ec. (1.41).

Entonces, incluyendo al potencial de red V_L , el Hamiltoniano más general del sistema de N bosones escrito en segunda cuantización es

$$H = H_T + H_W, \quad (1.51)$$

donde H_T es la parte del Hamiltoniano debida a la energía cinética $T = \frac{p^2}{2m}$ y el potencial unidimensional V_L

$$H_T = \sum_{ij} a_i^\dagger \langle \varphi_i | T + V_L | \varphi_j \rangle a_j, \quad (1.52)$$

y H_W es la parte del Hamiltoniano debida a la interacción intrapartículas

$$H_W = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger \langle \varphi_i \varphi_j | W | \varphi_k \varphi_l \rangle a_k a_l. \quad (1.53)$$

Los operadores de creación y aniquilación cumplen la regla de conmutación usual $[a_k, a_j^\dagger] = \delta_{k,j}$, y $|\varphi_i\rangle$ son un conjunto completo de funciones de onda ortonormales y estados estacionarios de H_T .

Se escoge que el potencial V_L sea simétrico respecto al origen, lo que resulta en un potencial no periódico. En general, puede considerarse cualquier potencial siempre que cumpla con la condición de que dados n pozos, el espectro de energías sea tal que los n primeros niveles estén por debajo de las barreras del potencial. Además, se puede demostrar que para un potencial de n pozos, las energías se separan en bandas de n niveles de manera que la separación entre los niveles consecutivos de cada banda es mucho menor

que la separación entre las bandas [4] [3], de manera análoga al potencial de un cristal (ver Fig. 1.1). La separación de energía, tanto entre las bandas como entre niveles consecutivos depende de la profundidad de los pozos y la separación entre ellos.

Como el sistema es un gas de bosones que se encuentra a muy bajas temperaturas, sólo los niveles más bajos de energía se encuentran ocupados, por tanto, sólo se seleccionarán para trabajar los n primeros estados asociados a la primera banda de energía, lo que se conoce como aproximación de n modos dado un potencial de n pozos. Aunque en general las n -tuplas son tales que dos niveles en cada una no son equiespaciados, se puede garantizar que lo estén ajustando el ancho y profundidad de los pozos. En este trabajo, dicha suposición será considerada. Experimentalmente, esto se logra variando la intensidad y longitud de onda de los láseres que forman el potencial (Fig. 1.1) para el caso de $n = 3$).

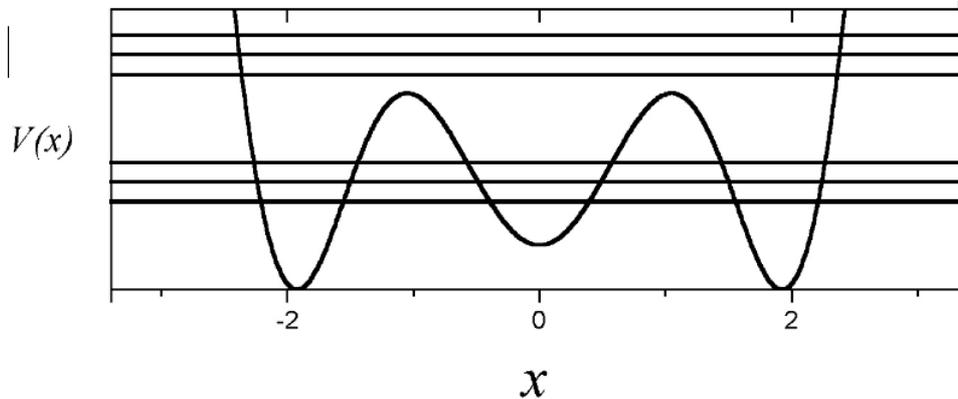


Figura 1.1: Trampa óptica de tres pozos. La amplitud de los pozos de los extremos es menor que la del centro aunque su profundidad es mayor, esto es debido a que se necesita asegurar que los tres niveles más bajos de energía estén igualmente espaciados. Las energías correspondientes son: $-\varepsilon_0 = 3.533$, $-\varepsilon_1 = 3.704$ y $-\varepsilon_2 = 3.881$. El cuarto nivel $-\varepsilon_3 = 8.999$ se encuentra por encima de los máximos de potencial $-(V_0 = 7.04)$.

Usando el método de “*Split Operator*” [35], las n primeras funciones de onda estacionarias $\varphi_i(x)$ y sus correspondientes energías pueden ser encon-

tradas numéricamente como se puede ver en la Fig. 1.2.

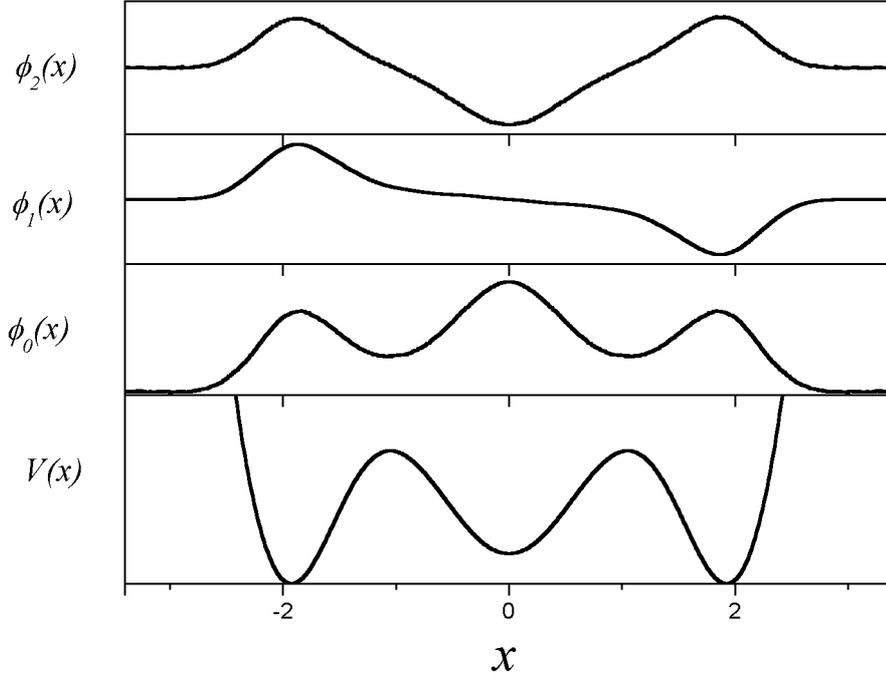


Figura 1.2: Las funciones de onda $\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$ y $\varphi_2(x)$ para un potencial externo $V_L = V_0 e^{-(x-2)^2/\sigma_1^2} + V_1 e^{-x^2/\sigma_2^2} + V_2 e^{-(x+2)^2/\sigma_1^2} + V_3 x^{10}$. El primer estado estacionario φ_0 es una función par sin nodos, el segundo estado φ_1 es impar con un solo nodo y el tercer estado φ_2 es una función par con dos nodos, como era esperado dada la simetría del potencial.

A pesar de que las funciones de onda $\varphi_i(x)$ son eigenestados de H_T , el interés del presente trabajo reside en estudiar las poblaciones de partículas en cada pozo, por lo que resulta más conveniente hacer el estudio a través de una base de funciones ortonormales diferentes; esta base es tal que las funciones de onda de una partícula se encuentran localizadas en cada pozo. Entonces, se realizará una transformación de la base de eigenestados a una de estados localizados.

Dado que se ha escogido que los niveles de energía en el potencial de n pozos estén igualmente espaciados, se puede establecer una analogía entre

los eigenestados de la componente z del operador de momento angular J y las funciones de onda de una partícula asociadas al potencial de n pozos, pues como es bien sabido, las energías de la componente J_z están igualmente espaciadas. Entonces, si se toma un sistema de tres niveles (como el de dos partículas con espín $1/2$) y se rotan 90 grados sus eigenestados $|11\rangle$, $|10\rangle$ y $|00\rangle$, los estados resultantes se escriben como una combinación lineal de los estados originales:

$$\frac{1}{2} \left[|11\rangle + \sqrt{2}|10\rangle + |00\rangle \right], \quad (1.54)$$

$$\frac{1}{2} \left[|11\rangle - \sqrt{2}|10\rangle + |00\rangle \right], \quad (1.55)$$

y

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|11\rangle + |00\rangle \right]. \quad (1.56)$$

En general, para un sistema de n niveles, tómesese en cuenta la siguiente rotación:

$$\psi_i = \sum_{k=0}^{n-1} D_{i,k+1}^j \varphi_k, \quad (1.57)$$

con los coeficientes dados por la matriz de rotación de Wigner [36]

$$D_{i,k+1}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, k+1 | e^{-i\alpha j_z} e^{i\beta j_y} e^{-i\gamma j_x} | j, i \rangle, \quad (1.58)$$

siendo $\alpha = 0$, $\beta = \frac{\pi}{2}$ y $\gamma = \frac{\pi}{2}$. Se identifica el número de pozos n con el número de momento angular j . El conjunto de estados a transformar $\langle k+1 |$ son los asociados a las funciones estacionarias φ_k y los estados rotados $|i\rangle$ están asociados a las funciones de onda localizadas ψ_i .

El conjunto de funciones de onda φ_k son funciones estacionarias, con lo cual se cumple

$$(T + V_L) |\varphi_k\rangle = \epsilon_k |\varphi_k\rangle . \quad (1.59)$$

Entonces, la parte sin interacción del Hamiltoniano se transforma en

$$H_T = \sum_k^{n-1} \epsilon_k a_k^\dagger a_k . \quad (1.60)$$

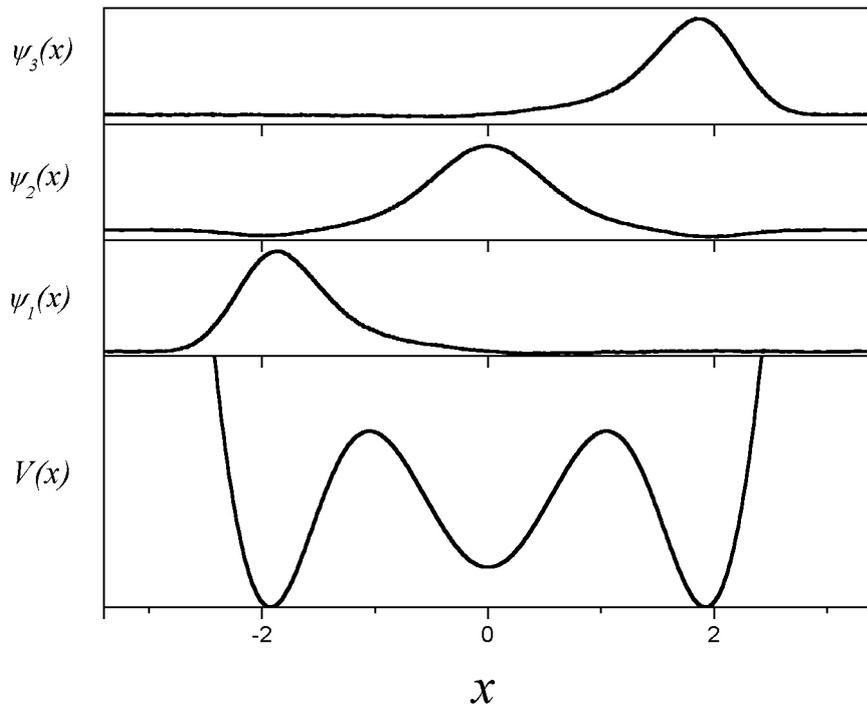


Figura 1.3: Funciones de onda localizadas al realizar la respectiva rotación. Visualmente, se aprecia que éstas son efectivamente localizadas. El traslape entre las funciones es menor al 6%.

Al aplicar la rotación, el Hamiltoniano (1.60) se reescribe de la siguiente manera

$$H_T = - \sum_{i,j}^{n-1} \Delta_{i,j} \left(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i \right) , \quad (1.61)$$

$\Delta_{i,j}$ es la tasa de tunelaje entre los sitios i y j . Como las funciones rotadas son funciones localizadas (Fig. 1.3), la tasa de tunelaje entre pozos no adyacentes es mucho más pequeña que la que existe entre sitios adyacentes, por lo cual, se puede tomar en cuenta sólo la tasa para los vecinos más cercanos. Más aún, si los niveles de energía de la primera banda se encuentran igualmente espaciados, la tasa de tunelaje entre pozos no adyacentes es idénticamente cero. Entonces

$$H_T = - \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_{i,i+1} \left(b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right) . \quad (1.62)$$

Los coeficientes $\Delta_{i,i+1}$ incluyen un factor que es el espaciamiento entre niveles de energía $\varepsilon_k - \varepsilon_{k-1} = \Delta$ y otro factor propio de la transformación, en otras palabras, los coeficientes $\Delta_{i,i+1}$ dependen de la posición i -ésima dentro del potencial.

Puesto que el conjunto de funciones resultante de la rotación ψ_i es localizado, sus correspondientes operadores b_i^\dagger (b_i) crean (o destruyen) un bosón en el i -ésimo pozo.

En resumen, el Hamiltoniano de un gas de bosones ultrafrío en un potencial unidimensional, sin potencial de interacción entre partículas, puede ser escrito de manera no diagonal de manera que su comportamiento quede determinado por el tunelaje de partículas entre pozos adyacentes.

La parte del Hamiltoniano que toma en cuenta la interacción entre partículas también es importante para determinar la dinámica de tunelaje del sistema. Reescribiendo la Ec. (1.53) hasta los primeros n niveles,

$$H_W = \sum_{ijkl=0}^n w_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l, \quad (1.63)$$

con

$$w_{ijkl} = \frac{g}{2} \int dx \varphi_i(x) \varphi_j(x) \varphi_k(x) \varphi_l(x). \quad (1.64)$$

En general, las funciones de onda estacionarias φ_k tienen una paridad definida, debido a que el potencial unidimensional V_L se escogió simétrico respecto al origen. En consecuencia, algunos de los coeficientes w_{ijkl} desaparecerán. Es decir,

$$H_W = \sum_{ijkl=0}^{n-1} w_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l; \quad i + j + k + l = 0, 2, 4, \dots \quad (1.65)$$

Al igual que con el Hamiltoniano H_T , cuando se realiza la sustitución del conjunto de operadores de creación y aniquilación $\{a_i^\dagger, a_k\}$ por el conjunto $\{b_i^\dagger, b_i\}$, aparecen términos de tunelaje entre diferentes pozos. Estos términos pueden ser ignorados, pues cumplen que

$$\int \psi_i(x) \psi_j(x) = \delta_{ij}. \quad (1.66)$$

Es decir, las funciones de onda resultantes de la rotación son efectivamente localizadas y el traslape entre ellas es aproximadamente 0.

Finalmente, el Hamiltoniano efectivo que describe un gas de N átomos de Bose con interacción entre partículas confinado en un potencial externo simétrico y niveles de energía igualmente espaciados puede escribirse como

$$H = H_T + H_W, \quad (1.67)$$

con

$$H_T = - \sum_{i=1}^{n-1} \Delta_{i,i+1} \left(b_i^\dagger b_{i+1} + b_{i+1}^\dagger b_i \right), \quad (1.68)$$

$$H_W = U \sum_{i=1}^n \hat{N}_i \left(\hat{N}_i - 1 \right), \quad (1.69)$$

donde $U = \frac{g}{2} \int dx \psi_i^4(x)$, $g = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}$ y \hat{N}_i es el operador de número para el i -ésimo pozo.

1.4. El Hamiltoniano efectivo para el caso de 2, 3 y 4 pozos

Retomando la Ec. (1.60), se desarrolla la suma de H_T para $n = 2, 3, 4$.

$n = 2$

$$H_T = \varepsilon_0 a_0^\dagger a_0 + \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1, \quad (1.70)$$

$n = 3$

$$H_T = \varepsilon_0 a_0^\dagger a_0 + \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \varepsilon_2 a_2^\dagger a_2, \quad (1.71)$$

$n = 4$

$$H_T = \varepsilon_0 a_0^\dagger a_0 + \varepsilon_1 a_1^\dagger a_1 + \varepsilon_2 a_2^\dagger a_2 + \varepsilon_3 a_3^\dagger a_3. \quad (1.72)$$

A partir de la matriz de rotación de Wigner (Ec. (1.58)), las rotaciones para $n = 2, 3, 4$ están dadas por

$n = 2$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}, \quad (1.73)$$

$n = 3$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (1.74)$$

$n = 4$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{8}} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} & \sqrt{3} & 1 \\ \sqrt{3} & 1 & -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 & 1 & -\sqrt{3} \\ 1 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}. \quad (1.75)$$

Con lo cual, los Hamiltonianos sin interacción H_T correspondientes son:

$n = 2$

$$H_T = -\frac{\Delta}{2} (b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1), \quad (1.76)$$

$n = 3$

$$\begin{aligned} H_T = & -\frac{\Delta}{\sqrt{8}} \left[(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2) \left(1 + \frac{1}{q}\right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_1) \left(1 - \frac{1}{q}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} (b_2^\dagger b_2) \left(1 - \frac{1}{q}\right) \right], \end{aligned} \quad (1.77)$$

$n = 4$

$$\begin{aligned}
H_T = & -\frac{\sqrt{3}\Delta}{8} \left\{ \left[b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 - (b_3^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_3) \right] \left(1 + \frac{2}{q} + \frac{1}{k} \right) \right. \\
& - \frac{1}{\sqrt{3}} (b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2) \left(3 + \frac{2}{q} + \frac{3}{k} \right) \\
& + \left[b_2^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_2 - (b_1^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_1) \right] \left(1 - \frac{1}{k} \right) \\
& + \frac{1}{\sqrt{3}} (b_1^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_1) \left(1 - \frac{2}{q} + \frac{1}{k} \right) \\
& \left. + \frac{2}{\sqrt{3}} (b_2^\dagger b_2 + b_3^\dagger b_3) \left(1 - \frac{1}{k} \right) \right\}, \tag{1.78}
\end{aligned}$$

donde $\epsilon_1 - \epsilon_0 = \Delta$, $\epsilon_2 - \epsilon_1 = \Delta/q$ y $\epsilon_3 - \epsilon_2 = \Delta/k$, $q, k > 0$ muestran las posibles separaciones entre niveles de energía. En cada expresión se eliminó un término de la forma $\sum \hat{N}_i = b_1^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_2 + b_3^\dagger b_3 + b_4^\dagger b_4$ que es el número total de partículas que al estar en un sistema cerrado resulta constante y, por lo tanto, puede omitirse, pues sólo da lugar a un corrimiento en la energía.

Las Ecs. (1.76) a (1.78) hacen más evidente el hecho ya mencionado de que el tunelaje dominante es el que se da entre pozos adyacentes y éste nunca desaparece. El tunelaje entre pozos no adyacentes se da de manera más débil y depende su existencia de la separación de los niveles de energía, ya que con niveles igualmente espaciados estos términos desaparecen.

En efecto, si en las Ecs. (1.76) a (1.78), $k = q = 1$, entonces los Hamiltonianos para 2, 3 y 4 pozos se escriben:

$n = 2$

$$H_T = -\frac{\Delta}{2} \left(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 \right), \quad (1.79)$$

$n = 3$

$$H_T = -\frac{\Delta}{\sqrt{2}} \left(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2 \right), \quad (1.80)$$

$n = 4$

$$H_T = -\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \left\{ b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 - \left(b_3^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_3 \right) - \frac{2}{\sqrt{3}} \left(b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2 \right) \right\}. \quad (1.81)$$

A diferencia de H_T , el Hamiltoniano que toma en cuenta la interacción de los bosones H_W sólo genera términos extra si la condición (1.66) no se satisface. Es decir, su forma diagonal no depende de la profundidad del potencial, sino de qué tanta interferencia existe entre las funciones de onda transformadas. Como se está suponiendo que estas funciones se encuentran suficientemente localizadas, se puede escribir la forma de H_W dada por la Ec. (1.69) directamente, es decir, se considerará solamente el caso de niveles igualmente espaciados.

Entonces, para los casos particulares a estudiar, las ecuaciones finales son:

$n = 2$

$$H = -\frac{\Delta}{2} \left(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 \right) + U \left(\hat{N}_1 \left(\hat{N}_1 - 1 \right) + \hat{N}_2 \left(\hat{N}_2 - 1 \right) \right), \quad (1.82)$$

$n = 3$

$$\begin{aligned}
H = & -\frac{\Delta}{\sqrt{2}} \left(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 + b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2 \right) \\
& + U \left(\hat{N}_1 \left(\hat{N}_1 - 1 \right) + \hat{N}_2 \left(\hat{N}_2 - 1 \right) + \hat{N}_3 \left(\hat{N}_3 - 1 \right) \right),
\end{aligned} \tag{1.83}$$

$n = 4$

$$\begin{aligned}
H = & -\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \left\{ b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1 - \left(b_3^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_3 \right) - \frac{2}{\sqrt{3}} \left(b_2^\dagger b_3 + b_3^\dagger b_2 \right) \right\} \\
& + U \left(\hat{N}_1 \left(\hat{N}_1 - 1 \right) + \hat{N}_2 \left(\hat{N}_2 - 1 \right) + \hat{N}_3 \left(\hat{N}_3 - 1 \right) + \hat{N}_4 \left(\hat{N}_4 - 1 \right) \right).
\end{aligned} \tag{1.84}$$

Así como el primer sumando en estos Hamiltonianos representa el tunelaje entre pozos adyacentes, el segundo sumando representa la interacción entre pares de partículas dentro del mismo pozo. La fuerza de esta interacción es modulada por la energía de interacción $U = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m} \int dx \psi_i^4(x)$; como el valor de la integral es constante, la modulación queda enteramente en la longitud de dispersión α_s .

En el caso del tunelaje entre pozos, el término que modula su intensidad es la energía de tunelaje Δ . Entonces, el comportamiento del sistema y la transición del gas de bosones de un estado coherente a un régimen de autoatrapamiento puede estudiarse variando estos dos parámetros.

Capítulo 2

Análisis dinámico y estados estacionarios intrínsecos de la población de partículas en un potencial de n pozos

En este apartado se presentan los resultados obtenidos para la dinámica del sistema descrito en la sección 1.3. Esto se hace en dos partes. En la primera parte se analiza la evolución temporal del sistema para $n = 2, 3$ y 4 al resolver la ecuación de Schrödinger numéricamente para los Hamiltonianos de las Ecs. (1.56) (1.57) y (1.56), para determinar el valor de expectación de la población de partículas en cada pozo. Se muestra la existencia de un estado estacionario y su dependencia de los parámetros Δ y U , así como la presencia de los estados coherente y régimen de autoatrapamiento. En la segunda parte se calculan nuevamente los valores de la población, pero en términos de los eigenvalores y eigenvectores del Hamiltoniano, para mostrar que los eigenestados se comportan cualitativamente igual a los estados estacionarios

encontrados en la parte anterior.

2.1. La dinámica del sistema

Para el término H_W del Hamiltoniano efectivo, la fuerza de la interacción queda modulada únicamente por el parámetro $g = \frac{4\pi\hbar^2\alpha_s}{m}$, ya que la integral es un término constante. Entonces, la energía de interacción U y la energía de tunelaje Δ son los dos parámetros que determinan el comportamiento del sistema. Es posible manipular ambos, experimentalmente: Δ al variar la profundidad de los pozos y U al calibrar magnéticamente la amplitud de la dispersión, para estudiar la transición de estado entre superfluido al de un número de partículas por pozo constante. Esta transición se puede estudiar también bajo el modelo de Bose-Hubbard de n pozos, al variar la razón entre la energía de interacción y la energía de tunelaje. Para esto, conviene usar los operadores de número de cada pozo

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{N}_i}{N}, \quad (2.1)$$

siendo N el número total de partículas que se supone constante. Con esta definición resulta más oportuno escribir las funciones de onda ψ en una representación de número $|N_1N_2\rangle$, $|N_1N_2N_3\rangle$ y $|N_1N_2N_3N_4\rangle$ para los casos de 2, 3 y 4 pozos respectivamente, donde N_i , $i = 1, 2, 3, 4$ son el número de partículas por pozo en cada caso y $\sum N_i = N$. Como el sistema presenta $(N+1)(N+2)(N+3)/6$ estados posibles para 4 pozos, $(N+1)(N+2)/2$ para 3 pozos y $N+1$ para 2 pozos en cualquier instante, en general, para valores dados de U , Δ y N , se encuentra en una superposición de esos posibles estados. Entonces, el valor esperado de los operadores \hat{S}_i da la fracción del

número de partículas por pozo.

Esto da lugar a tres comportamientos cualitativamente distintos, que son:

- Oscilaciones coherentes o régimen superfluido.
- Oscilaciones de Josephson o régimen de estado estacionario.
- Régimen de autoatrapamiento (*selftrapping*) o de aislante de Mott (*Mott Insulator*)

Para ilustrar la existencia de estos regímenes, se estudió la dinámica para $N = 100, 1000, 10000$ partículas para dos pozos, $N = 50, 100, 200$ partículas para tres pozos y $N = 10, 15, 50$ partículas para cuatro pozos con la misma condición inicial $|N_1(t = 0)\rangle = N$. También se definió la razón entre la energía de interacción y la energía de tunelaje como $\Lambda = \frac{UN}{\Delta}$. Con estas condiciones, se procedió a desarrollar numéricamente la evolución temporal de los estados $|N_1N_2\rangle$, $|N_1N_2N_3\rangle$ y $|N_1N_2N_3N_4\rangle$ en cada caso, utilizando el método de diferencias finitas.

Cuando $U = 0$, el sistema es ideal y la población de partículas oscila coherentemente a través del potencial (Fig. 2.1). Éste es el estado equivalente al superfluido, pues las oscilaciones permanecen coherentes a lo largo del tiempo.

Cuando las interacciones sí son tomadas en cuenta ($U \neq 0$), se consideraron tres valores de Λ con diferentes órdenes de magnitud. Para interacciones débiles ($\Lambda = 0.1$), inicialmente los átomos oscilan coherentemente a través de los pozos de forma consistente con la condición inicial y entonces el sistema alcanza un estado estadísticamente estacionario (se nombra así para diferenciarlo de los estados estacionarios intrínsecos) donde el valor de expectación de la población oscila cerca del 50 %, 35 % y 28 % para 2, 3 y 4

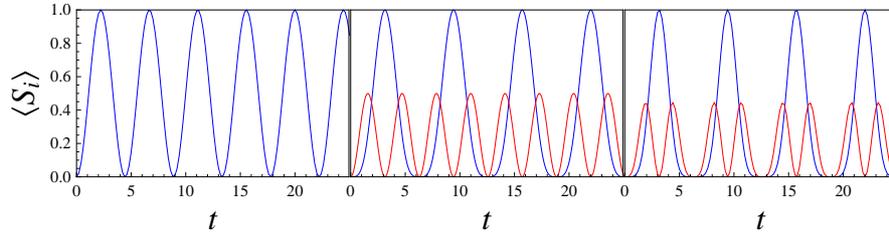


Figura 2.1: Para un sistema sin interacción $\Lambda = 0$, la evolución siempre muestra oscilaciones coherentes, aunque las amplitudes de estas dependen del pozo y de la condición inicial. En azul se muestra la población del pozo 1, en rojo la población del pozo 2.

pozos, respectivamente; después, dado que el sistema es cerrado, se observan recurrencias, es decir, se observan nuevamente las oscilaciones coherentes con regularidad casi periódica. Este estado es el de las oscilaciones de Josephson. Puede observarse en la Fig. 2.2 que el tiempo que el sistema pasa en la región estacionaria para una misma interacción débil de $\Lambda = 0.1$, se incrementa significativamente respecto al tiempo en la región de oscilaciones coherentes conforme el número de átomos se incrementa de $N = 100$ a $N = 1000$. Cuando la interacción aumenta ($\Lambda = 1.0$), la dinámica de las partículas es tal que permanecen esencialmente en el estado inicial, es decir, éste es un punto de transición hacia el estado de autoatrapamiento. Para interacciones fuertes ($\Lambda = 10.0$), el sistema prácticamente no oscila. El paso a un estado estacionario nunca es visto, pues sólo una pequeña cantidad de partículas tunela desde el pozo donde se encontraban inicialmente. Este estado donde los valores de $\langle \hat{S}_1 \rangle$ son prácticamente constantes es llamado de autoatrapamiento pues semeja el comportamiento de un aislante donde las partículas permanecen atrapadas en su estado inicial. Este estado es el análogo al de

aislante de Mott en el caso de electrones en un sólido a $T = 0$.

Entonces, existe una interacción crítica $\Lambda_c \approx 1$, debajo de la cual se dan las oscilaciones de Josephson y por encima, el autoatrapamiento. Entonces, las interacciones débiles se dan con $\Lambda \ll \Lambda_c$ y las fuertes con $\Lambda \gg \Lambda_c$.

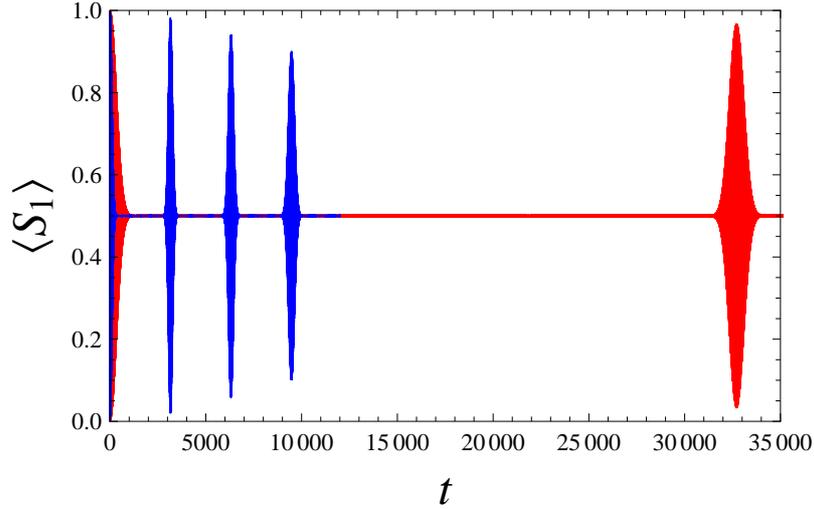


Figura 2.2: Evolución del sistema para dos poblaciones totales diferentes, $N = 100$ (azul) y $N = 1000$ (rojo). Cuando aumenta la población también aumenta el tiempo que el sistema pasa en los regímenes de oscilación coherente y de estadísticamente estacionario.

En las Figs. 2.3, 2.4 y 2.5, se muestra la evolución del valor de expectativa de $\langle \hat{S}_1 \rangle$ para los valores de $N = 100, 50, 25$ para 2, 3 y 4 pozos, respectivamente, con los tres valores de Λ escogidos. El comportamiento de $\langle \hat{S}_2 \rangle, \langle \hat{S}_3 \rangle, \langle \hat{S}_4 \rangle$ no se muestra pues es cualitativamente el mismo al ya enseñado.

En cada una de estas figuras se muestra los tres regímenes mencionados: coherente, estadísticamente estacionario y autoatrapamiento. En laFig. 2.3, se observa para los tres diferentes potenciales, cómo para interacciones débiles con tiempos cortos, la población completa de partículas oscila y, luego la amplitud de las oscilaciones disminuye hasta que se alcanza un comportamiento

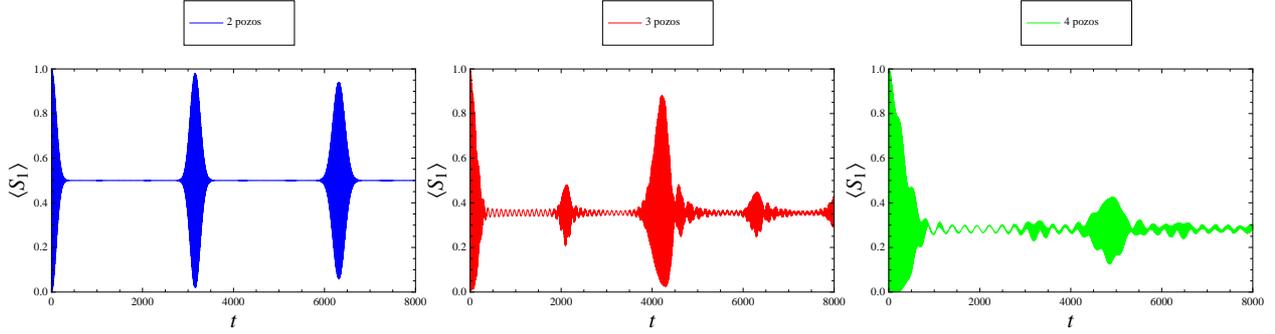


Figura 2.3: Evolución temporal de la población de átomos en el pozo uno S_1 en la base de funciones localizadas con una interacción de $\Lambda = 0.1$. (a) Dinámica del sistema para un potencial de dos pozos y $N = 100$. (b) La dinámica para el caso de tres pozos y $N = 50$. (c) El caso de cuatro pozos con $N = 25$.

estacionario. Para tiempos mayores, el sistema tiene las recurrencias mencionadas, en las que repite el comportamiento inicial con la diferencia de que las oscilaciones van disminuyendo en cada recurrencia y que éstas aumentan su duración. Para $\Lambda = 1.0$ en la Fig. 2.4, no sólo el comportamiento anterior se ha perdido, sino que el valor medio de $\langle \hat{S}_1 \rangle$ se encuentra por encima de los valores medios del régimen débil. En la interacción fuerte, Fig. 2.5, la población de átomos permanece esencialmente sin cambios respecto a la condición inicial, es decir, la mayoría de los átomos se encuentra en el primer pozo.

En las Figs. 2.4 y 2.5, se puede ver que el comportamiento en la población de partículas es cualitativamente el mismo para los casos de 3 y 4 pozos, sin embargo, existen algunas diferencias que vale la pena puntualizar. Primeramente, dado $\Lambda \ll \Lambda_c$, el tiempo que se necesita para que el sistema alcance su primer régimen estacionario aumenta al aumentar el número de pozos, así como también aumentan las fluctuaciones que realiza el sistema en estos regímenes, en otras palabras, aumenta la fracción media de partículas que logra el tunelaje a otros pozos. Para valores $\lambda \gg \Lambda_c$, las fluctuaciones

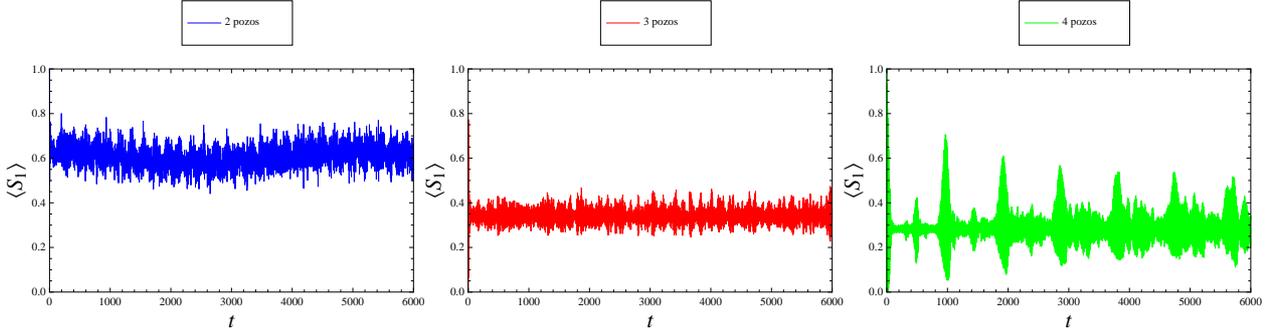


Figura 2.4: Evolución del valor esperado de la población de partículas en el pozo uno S_1 en la base de funciones localizadas con una interacción media de $\Lambda = 1.0$. El sistema pierde su coherencia con mayor rapidez y ya no la recupera. (a) Caso de dos pozos y $N = 100$. (b) Caso de tres pozos y $N = 50$. (c) Caso de cuatro pozos y $N = 25$.

del sistema en el estado de autoatrapamiento son tan grandes que, para el caso de 4 pozos, cerca de un 10 % de la población oscila a los otros pozos. En general, se puede decir que el aumento en el número de pozos tiende a incrementar las oscilaciones coherentes del sistema. En efecto, puesto que un mayor número de pozos implica un aumento en la deslocalización de las partículas, la coherencia de las oscilaciones es más grande.

Resumiendo, dada una condición inicial dada para un número fijo de partículas N , el sistema exhibe un transición continua de un estado de tunelaje coherente (oscilaciones de Rabi) a uno donde los átomos siempre van de tunular a través de las barreras de potencial a un régimen estacionario sin importar la condición inicial (oscilaciones de Josephson) conforme el valor del parámetro Λ aumenta, hasta un valor crítico Λ_c donde, en promedio, la población de partículas en cada pozo permanece igual al valor para el tiempo inicial (oscilaciones de Fock).

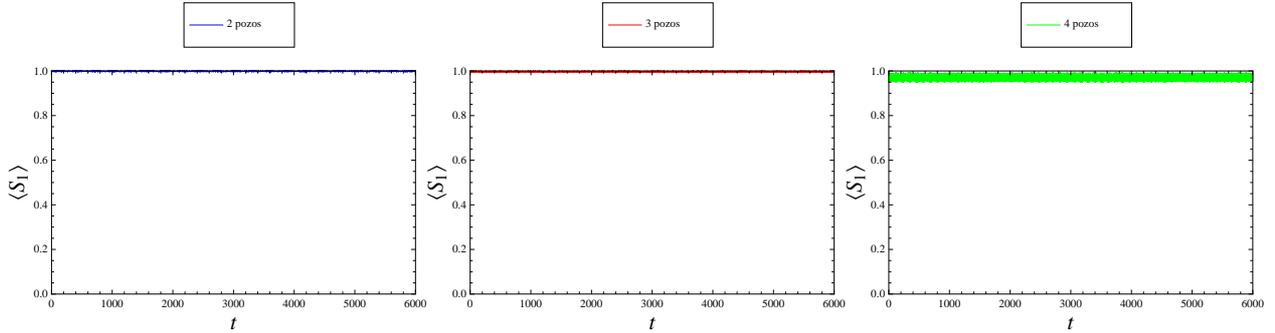


Figura 2.5: El valor esperado de la población de partículas en el pozo uno S_1 en la base de funciones localizadas con una interacción media de $\Lambda = 1.0$. La población es incapaz de escaparse de su condición inicial. (a) Caso de dos pozos y $N = 100$. (b) Caso de tres pozos y $N = 50$. (c) Caso de cuatro pozos y $N = 25$.

2.2. Población de partículas en los eigenestados del sistema

Ya se ha establecido que la transición coherente-autoatrapamiento, es función de la razón entre la energía de tunelaje y el potencial de interacción, pero también es cierto que para un valor fijo de Λ puede verse la transición como función de la condición inicial.

En efecto, si la condición inicial tomada corresponde a un estado estacionario intrínseco del sistema, entonces esa condición inicial es un eigenestado, ya que por definición, éste es un estado que es solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria. Por tanto, variar la condición inicial es equivalente a variar la energía del sistema. Entonces, pueden encontrarse estados de Fock con energía similar a la energía de algún eigenestado tal que se observe el régimen de autoatrapamiento.

Si ϕ_N son los eigenestados del Hamiltoniano (1.39) y ϵ_N sus correspondientes eigenenergías, al resolver el eigensistema $H|\phi_N\rangle = \epsilon_N|\phi_N\rangle$, se puede analizar la transición mencionada. En las Figs. 2.6, 2.7 y 2.8, se muestran los resul-

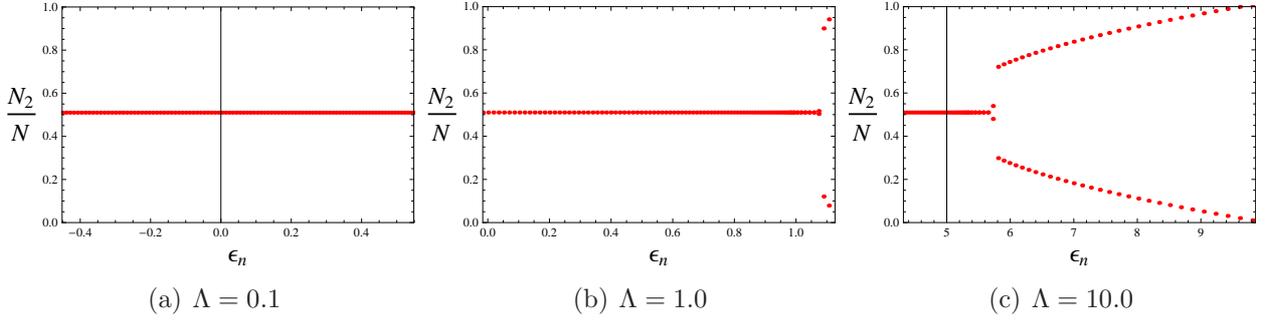


Figura 2.6: Valor de expectación de la fracción de partículas en el pozo 2 $\langle S_2 \rangle$ para la base de eigenestados como función de los eigenvalores de energías ϵ_n para $\Lambda = 0.1, 5.0$ y 10.0 en el caso de un potencial de dos pozos y $N = 100$.

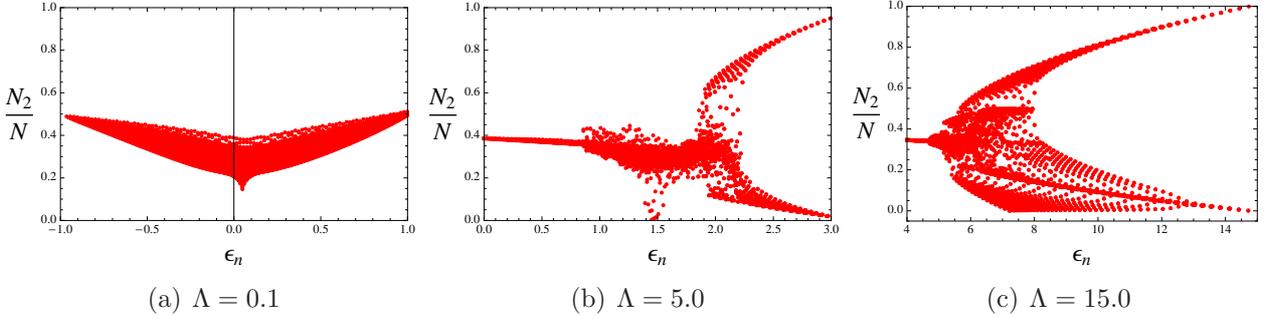


Figura 2.7: Número de partículas en el pozo dos $\langle S_2 \rangle$ como función de la energía ϵ_n en la base de estados estacionarios para el caso de un potencial de tres pozos y un número total de partículas de $N = 100$. Se dan tres valores para el parámetro Λ que muestran la transición entre coherente ($\Lambda = 0.1$) y autoatrapado ($\Lambda = 5.0$ y 10.0)

tados obtenidos a través de los valores de la población $\langle S_2 \rangle$ en la base de eigenestados como función de la energía por partícula $\epsilon_n = \langle \phi_N | H | \phi_N \rangle$ de tamaño $N + 1$, $(N + 1)(N + 2)/2$, $(N + 1)(N + 2)(N + 3)/6$ para 2, 3 y 4 pozos, respectivamente.

Se puede observar que el comportamiento de los estados estacionarios varía conforme aumenta el valor de Λ . Para la región de interacción débil ($\Lambda \sim 10^{-1}$), no existe un valor de energía tal que la población completa de partículas se encuentre en un solo pozo, es decir, no hay autoatrapamien-

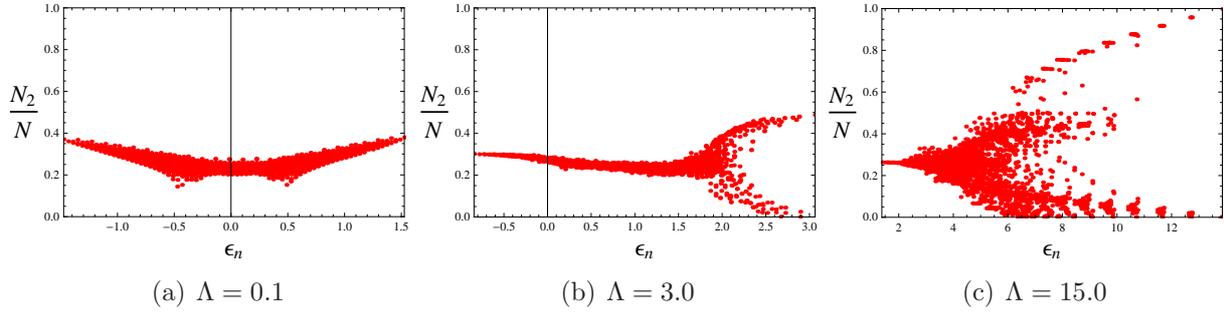


Figura 2.8: Valor de expectación de la población del pozo 2, $\langle S_2 \rangle$ para la base de eigenestados como función de la eigenenergías ϵ_n para $\Lambda = 0.1, 3.0$ y 15.0 en el caso de un potencial de cuatro pozos y $N = 25$. Al igual que el caso anterior, valores del parámetro Λ de un orden menor a uno no muestran la transición al autoatrapamiento.

to y, por tanto, el sistema no muestra transición alguna. Para interacciones mayores (Λ de orden mayor o igual a 1), claramente aparecen eigenenergías con estados en donde toda (o casi toda) la población se encuentra atrapada en uno de los pozos; más aún, conforme aumenta la energía, el sistema pasa de estados con población de aproximadamente $\frac{1}{\text{Núm. de pozos}}$ (es decir, la población se distribuye uniformemente entre los pozos del potencial), a uno donde la población se desbalancea y el sistema escoge uno de los pozos para contener la totalidad de las partículas. Por tanto, el sistema realiza una transición de un estado deslocalizado al de autoatrapamiento.

La transición puede describirse como un rompimiento de simetría para los estados estacionarios, ya que el Hamiltoniano es simétrico para el intercambio de pozos externos (o internos, para el caso de 4 pozos), pero las poblaciones eligen sólo uno de los pozos para el autoatrapamiento, acabando así con la simetría.

Entonces, se tienen dos diferentes tipos de estados estacionarios, los intrínsecamente estacionarios (eigenestados), para los cuales sucede el autoatrapamiento en función del aumento en la energía, y los estadísticamente

estacionarios, que realizan la misma transición conforme la interacción entre pares de partículas se incrementa. ¿Están estas dos formas de estacionariedad relacionadas? Sí, una vez que se ha visto que el sistema ha alcanzado la estacionariedad estadística, la información queda contenida en el promedio temporal de N_2 y, por lo tanto, las propiedades del sistema quedan descritas por los valores de la media de $N_2(t)$ de todos los posibles estados en la representación de número.

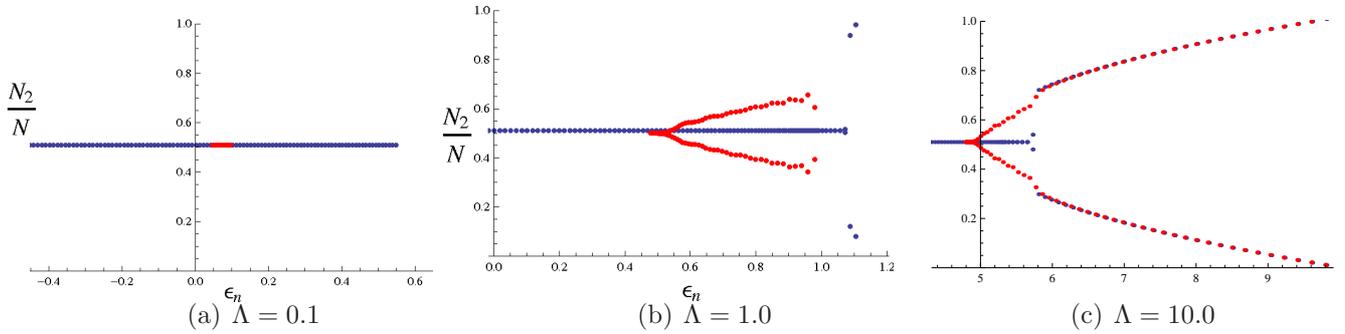


Figura 2.9: Comparación del valor de expectación de la población de partículas en un potencial de dos pozos, entre la base de estados localizados (rojo) y la base de eigenestados (azul) como función de la energía. El comportamiento cualitativo en ambos casos es el mismo.

En las Figs. 2.9, 2.10 y 2.11 se muestran los promedios temporales de N_2 para $N = 100$ y $\Lambda = 0.1, 1.0, 10.0$ para el potencial de dos pozos, $N = 90$ y $\Lambda = 0.1, 3.0, 15.0$ para el potencial de tres pozos, y $N = 25$ y $\Lambda = 0.1, 3.0, 15.0$ para el potencial de cuatro pozos respectivamente (en color rojo). En todos los casos, se grafica contra los valores esperados de la energía ε en la base de estados localizados. También se incluye en cada caso, las gráficas del valor de expectación en la base de eigenestados en función de las eigenenergías de las Figs. 2.6, 2.7 y 2.8.

Se ve que el valor medio de los valores esperados en la base de funciones localizadas coincide cualitativamente bien con los valores esperados en la

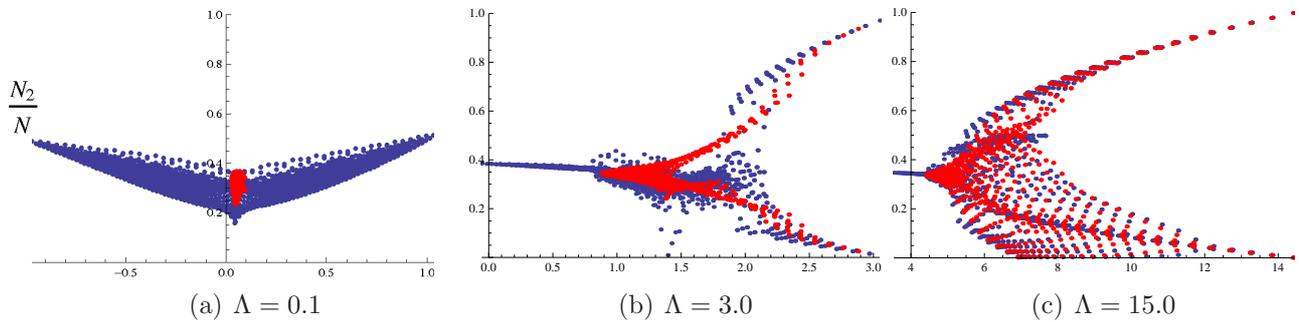


Figura 2.10: Valor esperado de la población en la base de estados localizados (rojo) y en la base de eigenestados (azul) para el potencial de 3 pozos. En ambos casos se presenta la transición del régimen coherente al de autoatrapamiento.

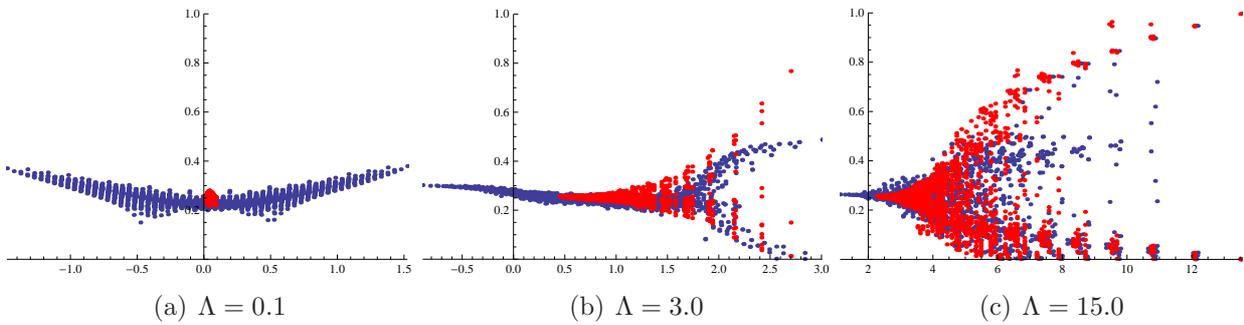


Figura 2.11: Tal como en los casos anteriores, en un potencial de 4 pozos, las poblaciones en la base de funciones localizadas (rojo) y de estados estacionarios (azul) tienen el mismo comportamiento cualitativo.

base de eigenestados, es decir, al incrementar Λ , los estados estadísticamente estacionarios presentan la transición de oscilaciones coherentes al autoatrapamiento. Sin embargo, punto a punto existen diferencias debido principalmente a que las energías de los estados de Fock no barren completamente el mismo espectro que las eigenenergías; sin embargo, cuando aumenta Λ , las desviaciones se hacen cada vez más pequeñas. Por tanto, se puede decir que ambas formas de estados estacionarios siguen el mismo comportamiento.

Capítulo 3

Decoherencia intrínseca en un potencial de n pozos

Un camino muy usado para analizar la decoherencia en los sistemas cuánticos es el uso de la matriz de densidad, pues la decoherencia puede ser establecida formalmente si se exhibe que los elementos fuera de la diagonal en la matriz de densidad que describe al sistema, se vuelven estacionarios al pasar el tiempo, es decir, la decoherencia está asociada con la evolución de la matriz de densidad en el sentido de que estados iniciales arbitrarios (coherentes) tienden a relajarse a estados estacionarios (incoherentes). Basta entonces, encontrar el estado de N cuerpos $|\psi_N(t)\rangle$ para calcular la matriz de densidad correspondiente $\hat{\rho}_N = |\psi_N(t)\rangle\langle\psi_N(t)|$ y ver cómo evolucionan los elementos no diagonales.

Sin embargo, usar la matriz de densidad completa no tiene caso, ya que representa un estado cuántico puro cuyos elementos no se vuelven estacionarios. En efecto, puesto que hablar de decoherencia es equivalente a hablar de relajamiento al equilibrio del sistema (fenómeno que sucede cuando el sistema interactúa con sus alrededores), considerar la matriz de densidad completa

corresponde a considerar al sistema cerrado como sistema más alrededores cuya evolución es coherente. Por tanto, para estudiar la decoherencia, se necesita considerar el sistema con la matriz de densidad reducida y propiedades de pocos cuerpos para determinar si los estados iniciales tienden al equilibrio.

Por otro lado, la Mecánica Estadística establece que un sistema cerrado siempre se relaja a un estado estacionario de equilibrio, por lo que se puede pensar que todo sistema cerrado da lugar a una decoherencia propia o intrínseca cuando éste alcanza el equilibrio. Dicho equilibrio se manifiesta a través de propiedades de pocos cuerpos como la temperatura, la energía o la población. Como sólo se conocen estas propiedades como promedio, entonces hay que medir el valor de expectación de operadores de pocos cuerpos, cuyos valores pueden conocerse a través de la matriz de densidad reducida, y debido a que en el laboratorio la propiedad de pocos cuerpos que se puede medir es la población $S_i = b_i^\dagger b_i / N$, se analiza dicha cantidad a través de la matriz reducida de un cuerpo $\hat{\rho}_{\xi\xi'}^{(1)} = Tr \left(b_\xi \hat{\rho}_N b_{\xi'}^\dagger \right)$, con $\xi = 1, 2$ para dos pozos, $\xi = 1, 2, 3$ para tres pozos y $\xi = 1, 2, 3, 4$ para cuatro pozos.

Entonces, se estudia la evolución temporal de los elementos fuera de la diagonal de la matriz de densidad reducida de un cuerpo como función de Λ , en la ya usada base de Fock $|N_1 N_2\rangle$, $|N_1 N_2 N_3\rangle$ y $|N_1 N_2 N_3 N_4\rangle$ para los casos de 2, 3 y 4 pozos respectivamente, y la usual condición inicial $|N, N_i = 0\rangle$.

Para $n = 2$, con $N = 1000$ la matriz a estudiar es

$$\hat{\rho}_2^{(1)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) \\ \rho_{12}^*(t) & \rho_{22}(t) \end{pmatrix}; \quad (3.1)$$

con Λ variando entre $0 < \Lambda < 2$. Para $n = 3$, con $N = 100$ la matriz es

$$\hat{\rho}_3^{(1)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) & \rho_{13}(t) \\ \rho_{12}^*(t) & \rho_{22}(t) & \rho_{23}(t) \\ \rho_{13}^*(t) & \rho_{23}^*(t) & \rho_{33}(t) \end{pmatrix}; \quad (3.2)$$

con Λ variando entre $0 < \Lambda < 5$. Para $n = 4$, con $N = 10$ la matriz es

$$\hat{\rho}_4^{(1)}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & \rho_{12}(t) & \rho_{13}(t) & \rho_{14}(t) \\ \rho_{12}^*(t) & \rho_{22}(t) & \rho_{23}(t) & \rho_{24}(t) \\ \rho_{13}^*(t) & \rho_{23}^*(t) & \rho_{33}(t) & \rho_{34}(t) \\ \rho_{14}^*(t) & \rho_{24}^*(t) & \rho_{34}^*(t) & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

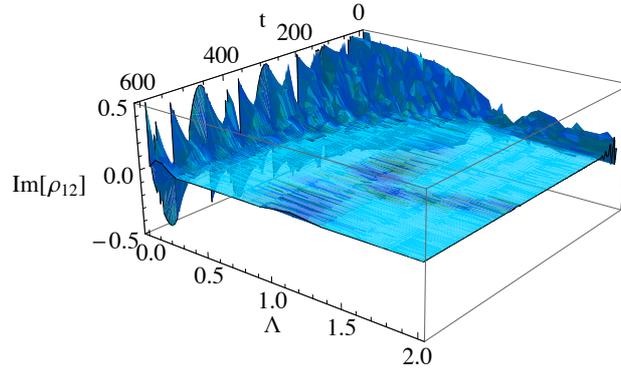


Figura 3.1: Evolución temporal de la parte imaginaria del elemento de la matriz de densidad reducida ρ_{12} conforme varía Λ . Las que eran oscilaciones para interacciones débiles, se transforman a un plano conforme aumenta la interacción. Es decir, se alcanza un estado estacionario.

En las Figs. 3.1, 3.2 y 3.3 se pueden ver los resultados obtenidos para los tres casos de 2, 3 y 4 pozos, cuyo comportamiento general es el mismo. Puede observarse que para valores pequeños de Λ las oscilaciones del elemento de la matriz de densidad no decaen a un valor constante al pasar el tiempo, mientras que para valores mayores, las oscilaciones no sólo son al principio de menor amplitud, sino que con el tiempo su valor se acerca cada vez más a un valor constante. Esto confirma que el hecho de que al aumentar la energía de interacción entre las partículas respecto al tunelaje, el sistema pierde la coherencia y termina relajándose a estados estacionarios incoherentes. Debe notarse que este método no capta el régimen de decaimiento a estados estacionarios estadísticos, pues las oscilaciones tienen la misma amplitud con la que iniciaron.

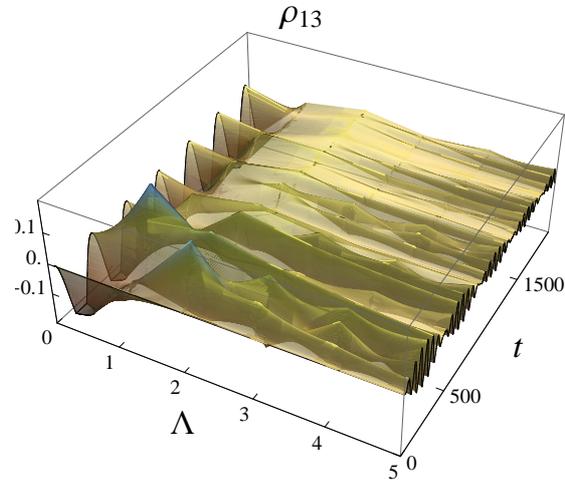


Figura 3.2: Evolución temporal para el elemento no diagonal de la matriz de densidad reducida ρ_{13} como función del parámetro Λ . Lo que comienza como una sábana de oscilaciones se alisa acercándose a la forma de un plano de altura cero conforme aumenta la interacción. Como el resto de los elementos fuera de la diagonal manifiestan el mismo comportamiento cualitativo, esto muestra que el sistema se vuelve decoherente.

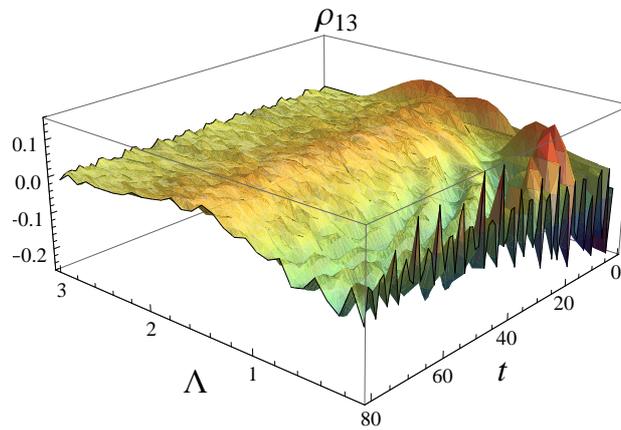


Figura 3.3: Evolución del elemento ρ_{13} de la la matriz de densidad reducida para cuatro pozos como función del parámetro Λ . Al igual que los casos anteriores, cuando aumenta la interacción disminuyen las oscilaciones en el valor de ρ_{13} .

Conclusiones

En este trabajo se estudió un gas ultrafrío de bosones con interacción, confinado en un potencial unidimensional simétrico compuesto de n pozos. Para esto, se derivó el Hamiltoniano efectivo que describe este sistema a partir del Hamiltoniano de N partículas con interacción en segunda cuantización.

El Hamiltoniano derivado describe el comportamiento de una red óptica, siempre que se cumpla que los primeros n niveles de energía se encuentren igualmente espaciados y que las funciones de onda de una partícula se encuentren bien localizadas (es decir, que los traslapes entre diferentes funciones de onda sean despreciables). Con estas condiciones, el tunelaje de partículas solo es posible entre pozos adyacentes.

La dinámica de las funciones de onda del sistema queda descrita por la ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano derivado. Para un número fijo de partículas, los coeficientes del término de tunelaje (Δ) y del término de interacción entre partículas (U) son los responsables de la evolución temporal del sistema.

Se estudió numéricamente la evolución de un sistema compuesto de 2, 3 y 4 pozos y para diferente número de partículas ($N = 100, 1000, 10000$ para 2 pozos, $N = 50, 100, 200$ para 3 pozos y $N = 10, 25, 50$ para 4 pozos). El comportamiento del sistema queda en términos de la razón entre la interacción y el tunelaje ($\Lambda = \frac{UN}{\Delta}$). Dado un N , es posible distinguir tres

regímenes distintos, dependiendo del valor de Λ : las oscilaciones coherentes $\Lambda = 0$, las interacciones débiles $\Lambda \ll 1$ y las interacciones fuertes $\Lambda \gg 1$. Durante las oscilaciones coherentes, las partículas tunelean entre todos los pozos sin ningún cambio al transcurrir el tiempo. En la interacción débil, la población de partículas comienza oscilando entre los pozos con una amplitud que depende de la condición inicial. Posteriormente, las oscilaciones disminuyen hasta que el sistema alcanza un estado estadísticamente estacionario en donde el valor de expectación de la población en cada pozo se vuelve constante. En este régimen, aunque las interacciones participan mínimamente, no son despreciables, pues son éstas las responsables de que el sistema alcance el estado estacionario y, por tanto, determinan el comportamiento de largo plazo. En la interacción fuerte, el término de tunelaje puede ser despreciado y el sistema evoluciona exclusivamente debido a la interacción entre las partículas en cada pozo, lo que provoca que las partículas se quedan atrapadas en su condición inicial. La región donde se da la transición entre el estado estadísticamente estacionario y el estado de autoatrapamiento está en donde $\Lambda = \Lambda_c \approx 1$.

El resultado más importante de este análisis es que bajo ciertas condiciones, el sistema evoluciona hacia un estado estadísticamente estacionario, en donde cualquier medición mostraría que una cierta fracción de la población se encontraría localizada en los pozos a pesar de que las partículas continúan tuneleando entre ellos.

La transición de estados coherentes a estados autoatrapados también fue estudiada bajo el punto de vista de los eigenvalores de las energías del Hamiltoniano efectivo descrito anteriormente. Para esto, se calcularon numéricamente los eigenestados y sus correspondientes eigenvalores del Hamiltoniano efectivo para 2 pozos con $N = 100$, 3 pozos con $N = 100$ y 4 pozos con

$N = 25$, tomando en cuenta diferentes valores de expectación. Con esto, se calcularon los valores de expectación de la población para cada uno de los pozos. En particular, se consideró el comportamiento del valor de expectación en el pozo 1 para ilustrar la transición del estado deslocalizado (oscilaciones coherentes) al estado autoatrapado.

Para una interacción dada $\Lambda \geq \Lambda_c$, se encontró que la transición de un estado a otro es función de la eigenenergía del sistema, es decir, la fracción de la población del primer pozo N_1 es distinta de 0 (ninguna partícula se encuentra en el pozo) y 1 (la totalidad de las partículas se encuentran en el pozo) para energías pequeñas, mientras que para energías grandes, la población del pozo tiende a los valores $N_1 = 0$, o $N_1 = N$.

Esto muestra que existen dos estados macroscópicamente diferentes y que la transición entre uno y otro rompe la simetría que existía en los eigenestados; los conjuntos de estados se van acomodando en los diferentes pozos cuando la energía aumenta.

A partir del estudio del comportamiento dinámico de la población de partículas, se estableció la existencia del estado estacionario. Dicha propiedad dio lugar a considerar en primera instancia al estudio de la decoherencia intrínseca del sistema ya descrito a través de su matriz de densidad de N cuerpos. Sin embargo, ya que el equilibrio del sistema puede ser visto mediante las propiedades de pocos cuerpos, se estudió en realidad la matriz reducida de un cuerpo para tratar la decoherencia durante el proceso de relajación al equilibrio.

Entonces, se calculó numéricamente la evolución temporal de la población para la matriz de densidad reducida de un cuerpo como función del parámetro de interacción Λ para un potencial con 2, 3 y 4 pozos y $N = 100, 100, 10$, respectivamente. Se encontró que los elementos fuera de la diagonal decaen a

valores constantes, lo que muestra que el sistema alcanza estados estacionarios y, por tanto, pierde la coherencia inicial.

Apéndice A

Condensación de Bose-Einstein.

Formulación teórica y obtención experimental

Puesto que el condensado de Bose-Einstein juega un papel fundamental dentro del estudio de este trabajo, en este capítulo se esbozará la manera en que aplicando la Mecánica Estadística a partículas bosónicas se obtiene la distribución de Bose y como con ésta se deduce el cambio de fase de un gas ideal normal al estado condensado.

También se revisarán brevemente las técnicas experimentales con las cuales se obtiene y se confina un condensado de Bose-Einstein.

A.1. La termodinámica de un gas de bosones en una trampa armónica

Considérese un sistema compuesto de un gas ideal de N bosones de volumen fijo V en un reservorio térmico a temperatura T . Estas variables termodinámicas sugieren el uso del ensamble canónico para encontrar las propiedades termodinámicas del sistema; sin embargo, este camino presenta dificultades de carácter matemático que alargan la obtención de la distribución del sistema sin agregar nada a la física del problema. Por esta razón, se aprovecha la equivalencia entre ensambles para simplificar el problema y se utiliza entonces el ensamble gran canónico.

La función de partición del ensamble gran canónico, llamada la función gran partición, es

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_N e^{\alpha N} \sum_m e^{-\beta E_m}, \quad (\text{A.1})$$

donde μ es el potencial químico, $\beta = 1/k_B T$ y $\alpha = \mu/k_B T$, siendo k_B la constante de Boltzmann.

Ahora bién, el sistema está constituido de N partículas independientes. por lo que el Hamiltoniano del sistema es la suma de los Hamiltonianos de las partículas individuales $H = \sum_m H_m$, por lo tanto, la energía total del sistema es la suma de las energías individuales del gas. Entonces, si n bosones se encuentran en el estado m (es decir, el número de ocupación n_m), la energía total del sistema es

$$E = \sum_m n_m \varepsilon_m, \quad (\text{A.2})$$

siempre y cuando la cantidad de partículas permanezca constante

$$\sum_m n_m = N. \quad (\text{A.3})$$

Usando las dos ecuaciones anteriores, la función gran partición puede reescribirse en términos de los números de ocupación:

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_m} \prod_m e^{(\alpha - \beta \epsilon_m) n_m}. \quad (\text{A.4})$$

La doble suma sobre las partículas y sobre los números de ocupación, con la restricción $\sum n_m = N$, puede reemplazarse por una sola suma en los números de ocupación que ya la incluye implícitamente, puesto que n_m suma sobre todos los valores de N . Entonces, la Ec. (A.1) queda:

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_m \sum_{n_m=0}^{n_{max}} e^{(\alpha - \beta \epsilon_m) n_m}. \quad (\text{A.5})$$

Se nota que la suma de la función gran partición es una suma geométrica, pues al trabajar con bosones, las N partículas pueden estar todas en el mismo estado cuántico, es decir, la suma corre hasta infinito. Entonces, se escribe $\Xi(T, V, \mu)$ como

$$\Xi_B(T, V, \mu) = \prod_m \frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}}. \quad (\text{A.6})$$

Para que la serie en efecto converga, se necesita que la condición $|e^{\alpha - \beta \epsilon_m}| < 1$ se cumpla, lo cual es cierto si

$$\mu < \epsilon_m \quad \forall m. \quad (\text{A.7})$$

El potencial químico μ tiene que ser menor que todas las energías del gas, en particular, debe ser menor que el nivel fundamental individual ϵ_0 , que se

tomará como 0.

Una vez conocida la función gran partición se pueden obtener todas las relaciones termodinámicas siguiendo las reglas usuales. Así, el gran potencial $\Omega_B(T, V, \mu)$ es

$$\Omega(T, V, \mu) = -kT \ln(\Xi_B(T, V, \mu)) = kT \sum_m \ln(1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_m}) . \quad (\text{A.8})$$

El número medio de partículas se obtiene

$$\bar{N} = \frac{\partial \Omega(T, V, \mu)}{\partial \mu} = \sum_m \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1} ; \quad (\text{A.9})$$

como se debe verificar que $\sum \bar{n}_m = \bar{N}$, se tiene que

$$\bar{n}_m = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_m - \alpha} - 1} , \quad (\text{A.10})$$

que es la llamada distribución de Bose-Einstein.

Ahora bien, si el sistema se encuentra confinado por un potencial externo dado, entonces se puede encontrar una forma explícita para la energía. Sea entonces, un potencial V similar al de las trampas donde se obtiene el condensado de Bose-Einstein, aproximado con un potencial armónico de la forma

$$V = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) , \quad (\text{A.11})$$

donde ω_x , ω_y y ω_z son las frecuencias angulares del potencial en cada dirección.

Si el potencial armónico es isotrópico, entonces $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ y el potencial queda de la forma

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad (\text{A.12})$$

con un Hamiltoniano en términos del operador de número

$$H = \sum_{i=1}^N \hbar\omega(\hat{n}_{xi} + \hat{n}_{yi} + \hat{n}_{zi}) \quad (\text{A.13})$$

y niveles de energía dados por

$$E_{ijk} = \hbar\omega(i + j + k); \quad i, j, k = 0 \dots \infty. \quad (\text{A.14})$$

Se observa que

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1, \quad (\text{A.15})$$

pues

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\hbar\omega}{N\hbar\omega} = \frac{1}{N} \longrightarrow 0, \quad (\text{A.16})$$

para N suficientemente grande. Esto quiere decir que es posible definir una conveniente densidad de estados $\rho(E)$, pues para calcular la energía media $\bar{E} = \sum_m \epsilon_m \bar{n}_m$ se prefiere cambiar la suma infinita sobre los microestados a una integral, argumentando que al considerar sistemas macroscópicos, el volumen del sistema es tan grande que las energías discretas de los microestados se encuentran tan pegadas una de otra que para propósitos prácticos son un continuo (es decir, se cumple la condición (A.15)). Este argumento debe tomarse con tacto, ya que cuando $\alpha \longrightarrow 0$ la Ec. (A.10) diverge para el estado base $\epsilon_0 = 0$. Esto se debe a que para la forma continua de sumar (la integral) el estado base no contribuye en nada. Para altas temperaturas esto no trae grandes consecuencias, sin embargo, si la temperatura disminuye,

más partículas se encontrarán en el estado base y, por tanto, lo correcto es escribir explícitamente su contribución y reemplazar el resto de la suma por la integral. Entonces,

$$\bar{N} = n_{m=0} + \sum_{m>0} n_m. \quad (\text{A.17})$$

Para transformar la suma en una integral se tiene que escribir en términos de la densidad de estados del sistema ($f(E)$); para esto se define una energía adimensional de la siguiente forma:

$$\epsilon_{ijk} \equiv \frac{\epsilon_{ijk}}{\hbar\omega} = i + j + k, \quad (\text{A.18})$$

con lo cual, la energía media es

$$\bar{E} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \bar{n}_{ijk} \rightarrow \int d\epsilon f(\epsilon) \epsilon_{ijk} \bar{n}_{ijk}. \quad (\text{A.19})$$

Dado ϵ , el número de estados con energía menor o igual es la cantidad de puntos (x, y, z) que se encuentran dentro del volumen del tetraedro con aristas de tamaño $L = i + j + k$. Entonces, la densidad de estados es

$$f(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2(\hbar\omega)^3}. \quad (\text{A.20})$$

La energía media queda como

$$\bar{E} = \frac{1}{2(\hbar\omega)^3} \int d\epsilon \frac{\epsilon^3}{e^{\beta\epsilon-\alpha} - 1}. \quad (\text{A.21})$$

La integral debe recorrer todos los estados, por lo tanto, debe ir desde 0 a infinito (esto será cierto para el resto de las integrales que aparezcan desde ahora, por lo que no se escribirán los límites de integración).

Realizando el cambio de variable $x = \beta\epsilon$ y tomando en cuenta que las

funciones de Bose son

$$g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int dx \frac{x^{n-1}}{e^{x-\alpha} - 1}, \quad (\text{A.22})$$

se obtiene finalmente una expresión para la energía:

$$\bar{E} = 3k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 g_4(\alpha). \quad (\text{A.23})$$

Trabajando análogamente y usando que las funciones de Bose cumplen

$$\frac{dg_n(\alpha)}{d\alpha} = g_{n-1}(\alpha), \quad (\text{A.24})$$

se obtienen los siguientes resultados para el gran potencial y el número medio de partículas:

$$\Omega(T, \omega, \mu) = -k_B T \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 g_4(\alpha), \quad (\text{A.25})$$

$$\bar{N} = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 g_3(\alpha). \quad (\text{A.26})$$

Se observa en la expresión (A.25), que la dependencia del volumen del gran potencial se ha cambiado por una dependencia de la frecuencia ω . También se nota que la termodinámica del sistema queda en términos de las funciones de Bose. En efecto, si α se acerca a $-\infty$, la función de Bose se comporta como $e^\alpha \ll 1$ y la distribución de Bose-Einstein (A.10) tiende a la distribución clásica de Maxwell-Boltzmann; de la Ec. (A.26) se deduce que esto es equivalente a altas temperaturas (T) y/o bajas "densidades" ($N^* = N / \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^3$).

Análogamente, bajas temperaturas y/o altas "densidades" significa que α se acerca a 0, pero la función de Bose crece monótonamente por lo que existe una temperatura crítica T_c y una "densidad" crítica N_c^* tales que $\alpha = 0$ y

$g_3(\alpha)$ alcanza su máximo. Para temperaturas y densidades por debajo de las críticas, las funciones de Bose dejan de tener sentido debido a la restricción del potencial químico, el cual se había pedido fuera menor que el estado base $\varepsilon_0 = 0$. La fórmula del número de partículas se torna inservible y se debe usar el primer sumando de la Ec. (A.17), lo que significa que la mayoría de las partículas se han condensado en el estado base.

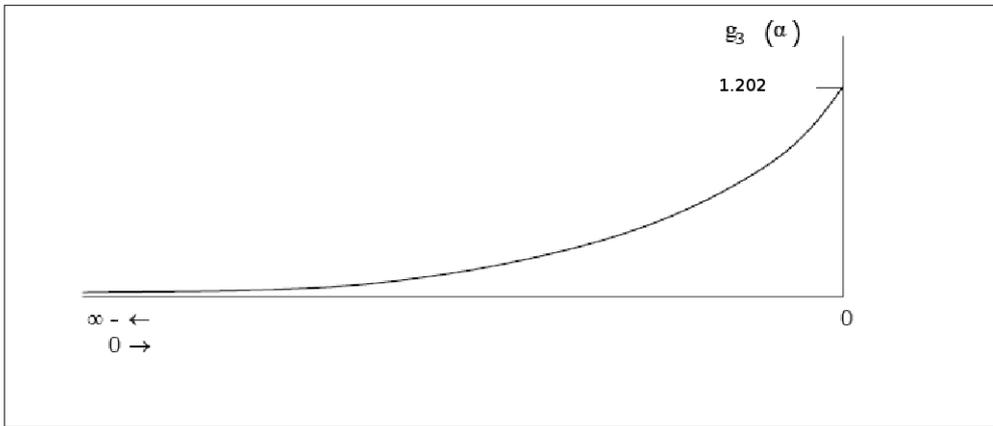


Figura A.1: Gráfica de la función de Bose $g_3(\alpha)$. La función de Bose va como la raíz de α cerca del cero y como la exponencial, lejos de éste. Obsérvese que la función de Bose tiene un máximo en el origen, el cual marca el cambio de fase del gas hacia el condensado de Bose-Einstein.

En efecto, retomando la Ec. (A.17),

$$N = N_c + \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 g_3(0), \quad (\text{A.27})$$

donde N_c es la contribución a la población debida a las partículas en el nivel fundamental, y en donde ya no cuesta nada quitar o meter partículas pues el potencial químico está en su nivel más bajo $\mu = 0$. Entonces,

$$N = N_c + N \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^3 \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T_c} \right)^3, \quad (\text{A.28})$$

por lo tanto,

$$\frac{N_c}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3. \quad (\text{A.29})$$

Esta ecuación da la fracción de partículas que se encuentran en el estado base. Para $T > T_c$ el nivel fundamental está termodinámicamente vacío, el número de bosones es despreciable desde el punto de vista macroscópico, pero desde $T = T_c$, la población empieza a crecer con valores del orden de N hasta llegar a $T = 0$, donde todos los bosones están en el nivel fundamental. El sistema cambia de comportamiento y la variación de población en el estado base se convierte en una avalancha. Todos los bosones van cayendo al nivel fundamental en cantidades macroscópicas. Este cambio brusco de comportamiento es típico de una transformación de fase; en el caso de un gas que pasa al estado líquido, los átomos tratan de condensarse en el espacio, formando de esta manera gotas. En el caso presente, el cambio de fase es de distinta naturaleza, ya que los bosones no se condensan en el espacio real (de coordenadas), sino en el origen del espacio de estados, por eso se le conoce a este cambio de fase como condensado de Bose-Einstein.

A.2. Técnicas de enfriamiento láser

En esta sección se describirán en forma breve las principales técnicas implicadas para la obtención experimental de un condensado de Bose-Einstein.

El dramático desarrollo de la espectroscopía láser en la década de los ochenta hizo posible el estudio experimental de partículas en regiones de ultrabaja energía, dando lugar a grandes avances en lo que respecta al comportamiento y propiedades de los gases atómicos ultrafríos [29] [30] [31].

Particularmente, para átomos neutros, el enfriamiento y confinamiento a través del láser ha vuelto rutinario preparar sistemas en la región de los

microkelvins, lo que ha permitido conseguir temperaturas suficientemente bajas (del orden de nanokelvins) para alcanzar la temperatura crítica para obtener un condensado de Bose-Einstein.

Debido al avance de la espectroscopía [32] [33], existen gran variedad de métodos para enfriar átomos neutros, sin embargo, sólo se verán los que son relevantes para alcanzar las temperaturas mencionadas.

A.2.1. Enfriamiento Doppler

Al igual que muchas de las técnicas de enfriamiento láser, el enfriamiento Doppler (en 1D) utiliza dos láseres opuestos que emiten luz ligeramente por debajo de la resonante. Debido al corrimiento producido por el efecto Doppler, un átomo moviéndose a través de los haces absorberá fotones del láser opuesto a su movimiento (corrimiento al azul) y será invisible al otro haz (corrimiento al rojo) (Fig. A.2.a). En consecuencia, los átomos interactúan más fuertemente con el haz del láser contrario al desplazamiento, recibiendo siempre momento en dirección contraria a su velocidad. Como la emisión espontánea del fotón absorbido es isotrópica, el efecto neto es la reducción de su velocidad y, por tanto, de su temperatura (Fig. A.2.b).

Pero el intercambio de momento entre el láser y los átomos está necesariamente cuantizado, por lo que la interacción se encuentra caracterizada por “patadas” de momento con tamaño $\hbar k$ con $k = 2\pi/\lambda$ el número de onda del fotón absorbido. Como esta cantidad es relativamente pequeña respecto al momento atómico, el proceso debe repetirse por varios ciclos para obtener una reducción en la velocidad efectiva en el conjunto de átomos. Sin ninguna otra influencia en el movimiento atómico, se podrían desacelerar los átomos hasta $v = 0$ y la muestra se encontraría a $T = 0$. Sin embargo, el enfriamiento es contrarrestado por un calentamiento debido a las fluctuaciones de momento

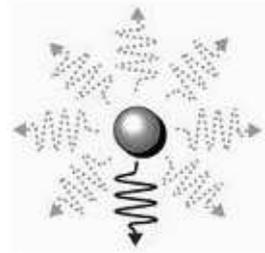
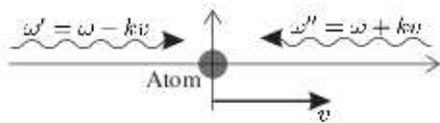


Figura A.2: (a) Los fotones que tienen una frecuencia ω en el sistema de referencia del laboratorio, el átomo los ve con frecuencias de $\omega' = \omega - kv$ y $\omega'' = \omega + kv$ en su sistema de referencia con velocidad v . (b) El átomo pierde el fotón en dirección arbitraria. Al final, se pierde energía por absorción.

por el rebote producido por los fotones emitidos espontáneamente, es decir, los átomos adquieren una pequeña velocidad en sentido contrario a la emisión del fotón. La competición entre este calentamiento y el enfriamiento determina la mínima temperatura alcanzable, llamada temperatura Doppler o límite del enfriamiento Doppler (T_D) y está dada por $T_D = \hbar\gamma/2k_B$, donde γ es el ritmo de dispersión. Los valores típicos para la temperatura Doppler se encuentran alrededor de $100\mu K$ lo cual es lo suficientemente frío para encerrar átomos en una trampa óptica, pero no suficiente para alcanzar la temperatura crítica del condensado, por lo que se requiere utilizar técnicas de enfriamiento que logren alcanzar temperaturas mucho más bajas.

A.2.2. Enfriamiento por gradiente de polarización

La temperatura Doppler es de cierta manera un límite artificial, pues supone a los átomos como partículas de sólo dos niveles de energía. Sin embargo, desde los primeros experimentos se observaron mediciones de temperatura por debajo del límite Doppler [21]. Para explicar este fenómeno se necesita tomar en cuenta la multiplicidad de niveles que forman el estado

atómico (como lo que sucede en el efecto Zeeman). Este nuevo mecanismo de enfriamiento a ultrabajas temperaturas se basa en dos fenómenos: bombeo óptico y gradientes de polarización laser.

El bombeo óptico es un proceso con el cual la luz es usada para llevar electrones de un nivel bajo de energía a uno más alto. Generalmente es usado para hacer transiciones entre subniveles de energía del estado base a través de ciclos de absorción y emisión espontánea. Como resultado del bombeo óptico, una distribución particular de población es alcanzada entre los varios subniveles del estado base.

Existen dos configuraciones básicas para conseguir que gradientes de polarización logren disipar energía y enfriar que (en 1D) dependen de la polarización de dos láseres opuestos con la misma frecuencia: polarizaciones lineales ortogonales (lin- \perp -lin) y polarizaciones contracirculares ($\sigma^+ - \sigma^-$). Cada configuración conlleva un proceso de enfriamiento diferente. Por simplicidad, sólo se hablará del esquema lin- \perp -lin.

En este caso, puede verse que la polarización total depende de las fases relativas de los dos haces. La polarización hace ciclos donde va de lineal a circular, a linear ortogonal, a circular opuesta, en el espacio de sólo la mitad de una longitud de onda de luz. Existe, en efecto, un gradiente de polarización.

Entonces, debido al desdoblamiento de energía del estado base, el gradiente de polarización causa una variación en el acoplamiento del estado base con los estados excitados debido a que las reglas de transición atómica son dependientes de la polarización.

Al desincronizar de manera adecuada los láseres, es posible crear una situación donde los átomos que se mueven en el gradiente de polarización ven un cambio de potencial. Durante los primeros $\lambda/4$, los átomos en un

subnivel deben escalar un valle de potencial hasta alcanzar la punta. En ese momento, los átomos son bombeados ópticamente a otro subnivel, es decir, al fondo del siguiente valle de potencial.

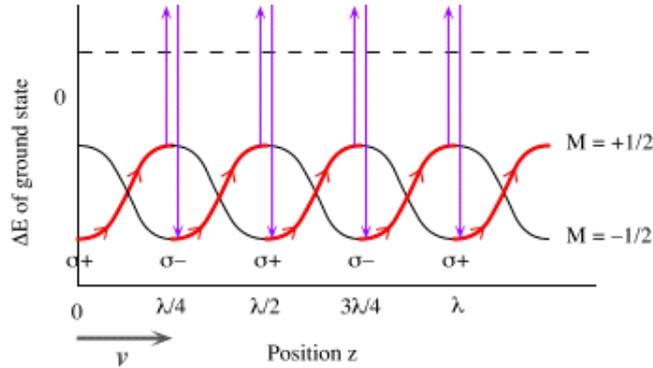


Figura A.3: Los átomos que empiezan en $z = 0$ y en el subnivel de $M = +1/2$ escalan el potencial hasta llegar a $z = \lambda/4$ en donde la luz se vuelve σ^- polarizada. Ahí, se fuerza al átomo al subnivel $M = -1/2$ por bombeo óptico, donde comienza a subir el potencial y se repite el proceso. Cada bombeo tiene como resultado la absorción de luz de menor frecuencia que la emitida.

El enfriamiento ocurre entonces debido a que la energía cinética es convertida en energía potencial para subir el valle y en el proceso de bombeo óptico esta energía se pierde por radiación [22]. Al igual que para el enfriamiento Doppler, el procedimiento debe repetirse cíclicamente para un enfriamiento efectivo del *ensemble* de átomos.

Tal como el enfriamiento Doppler y todos los métodos basados en ciclos de absorción y emisión, el enfriamiento por gradiente de polarización tiene un límite natural dado por el calentamiento que sufren los átomos por el retroceso al emitir fotones espontáneamente. Por tanto, se espera que el límite sea del orden de un cuanto de energía $\hbar k$, es decir, la temperatura de retroceso T_r esta dada por $T_r = \frac{\hbar^2 k^2}{mk_B}$.

La temperatura de retroceso es típicamente de unos cuantos μK , que son

temperaturas muy por debajo de la profundidad de las trampas ópticas, por lo que permite el llenado de las trampas muy eficientemente.

A.2.3. Enfriamiento Raman

Para superar el límite de la temperatura de retroceso, existen diferentes métodos, todos ellos basados en transiciones dentro de una banda estrecha, tal como los estados oscuros [23] o las transiciones Raman[2] entre subniveles del estado base, lo cual induce velocidades extremadamente selectivas. Cuando se aplica el segundo caso, se tiene entonces lo que se llama enfriamiento Raman.

En el enfriamiento Raman, se colocan dos láseres opuestos con una diferencia de frecuencias $\Delta\omega$ ligeramente menor a la separación entre los subniveles del estado base. Los átomos viajando contra la frecuencia mayor harán una transición del estado base $|1\rangle$ al estado base $|2\rangle$ con un cambio de momento $2\hbar k$ opuesto a su movimiento. Entonces un pulso de bombeo óptico los retornará al estado $|1\rangle$, con lo que sufrirán un cambio de momento aleatorio de tamaño $\hbar k$. Este proceso se repite varias veces, cada vez con $\Delta\omega$ más cerca de la separación de la estructura hiperfina, de manera que los átomos se acerquen cada vez más a la velocidad cero. La secuencia entera debe repetirse pero con la dirección de los haces al revés, ya que los átomos que viajaban hacia la frecuencia más baja no fueron afectados.

En cada ciclo existe un calentamiento por el retroceso aleatorio de la emisión espontánea, pero el cambio de momento bien definido de $2\hbar k$ opuesto a la velocidad de los pulsos Raman domina y, en promedio, los átomos disminuyen su velocidad.

El ancho final de la distribución de velocidades está determinado por la resolución espectral de los pulsos de Raman y puede alcanzarse ya el orden

de los nK .

A.2.4. Enfriamiento por evaporación

A pesar de las temperaturas extremadamente bajas que se pueden alcanzar con las técnicas de enfriamiento por láser ($\sim \mu K$), éstas son insuficientes para producir el condensado de Bose-Einstein, ya que el condensado no sólo requiere temperaturas ultrabajas, sino además una densidad suficiente en el espacio fase para lograr la transición al condensado.

Sin embargo, una alta densidad en el espacio fase del sistema al usar enfriamiento láser implica que los fotones dispersados de un átomo serán absorbidos por los otros, causando repulsión entre ellos. También sucede que para la luz resonante, el grosor óptico de la muestra enfriada hasta su límite de retroceso es tan grande que la luz no puede entrar ni escapar. Por último, el aumento de la densidad del espacio fase resulta en un incremento en la tasa de colisiones, especialmente entre átomos en estados excitados; como estas colisiones son inelásticas, el intercambio de energía aumenta la temperatura de los átomos. Para alcanzar el condensado de Bose-Einstein, métodos con luz resonante no son adecuados, por lo que se necesita una forma de enfriamiento para altas densidades del espacio fase. El enfriamiento por evaporación, usado por primera vez en 1988 [24], ha resultado ser la clave para alcanzar el condensado.

Esta técnica se basa en el fenómeno bien conocido en la vida diaria de la evaporación, en el cual las partículas más energéticas de un sistema con potencial finito lo abandonan de forma natural, resultando en que el resto de las partículas obtienen una menor temperatura y el sistema se enfría. Este proceso puede enfriar una taza de café o ser usado para construir enfriadores de agua.

En términos de la obtención de temperaturas ultrafrías, el enfriamiento por evaporación significa remover selectivamente aquellos átomos de una muestra confinada, cuya energía es más grande que la energía promedio, después de lo cual ocurre una termalización del resto de las partículas del gas por colisiones elásticas.

Aunque puede pensarse que la pérdida de átomos en una trampa es una desventaja para conseguir densidades altas, la técnica de evaporación es altamente eficiente, puesto que los átomos que permanecen tienen una temperatura media apreciablemente menor, con lo que también ocupan un volumen menor cerca del fondo de la trampa. Así, el enfriamiento por evaporación provoca una disminución, tanto en la temperatura como en el volumen y, por ende, la densidad en el espacio fase aumenta.

Para asegurar que la densidad sea en efecto grande, el enfriamiento por evaporación requiere que el ritmo de termalización sea corto comparado con el tiempo de vida de la muestra. Como el tiempo de vida queda determinado por las colisiones inelásticas y las colisiones elásticas son necesarias para la termalización, es la razón entre colisiones elásticas e inelásticas lo que determina las limitaciones del enfriamiento por evaporación. Este límite dependerá de la especie atómica, que para los alcalinos es ya de picokelvins.

A.3. Trampas para confinar átomos neutros

Para estudiar las regiones de ultrabaja energía, no sólo es necesario enfriar partículas en forma extrema, también es necesaria una manera de atraparlas y almacenarlas.

Para partículas cargadas, la formación de trampas y el enfriamiento de iones es conocido desde hace muchos años. Para estas trampas, la interacción

Coulombiana es usada para atrapar iones en campos electromagnéticos [25]. Una propiedad importante de las trampas iónicas es que su mecanismo de confinamiento no depende de la estructura interna de las partículas, lo que permite una gran variedad de experimentos.

Las partículas neutras, en cambio, sólo fue posible confinarlas hasta 1986 [26], aunque su rápido desarrollo ha permitido construir ensembles atómicos en el nivel de los microkelvin en forma rutinaria, por lo que la interacción necesaria para atrapar los átomos es mucho más débil que para los iones.

El confinamiento de átomos neutros por medios ópticos se basa en la interacción de la luz láser con los átomos. Específicamente, en la transferencia de momento entre el haz de fotones y las partículas atrapadas, lo que no sólo reduce su velocidad sino que los confina.

Existen dos grandes ramas de trampas para átomos neutros dependiendo del tipo de interacción usada para confinar a los átomos:

- **Trampas magnéticas** [27] [1]. El confinamiento de átomos neutros en este tipo de trampas depende de la interacción entre un campo electromagnético inhomogéneo y un momento dipolar magnético del estado base. Las trampas magnéticas representan trampas idealmente conservativas con profundidades del orden de $100 \mu K$ y son las trampas más adecuadas para el enfriamiento por evaporación y para conseguir el condensado de Bose-Einstein. Sin embargo, el hecho de que el mecanismo que atrapa los átomos recaiga sobre su estado interno impone una restricción fundamental y limita los experimentos concernientes a dinámicas internas. Aún más, las geometrías posibles también se encuentran limitadas por la necesidad del uso de magnetos permanentes.
- **Trampas ópticas dipolares.** A diferencia del momento dipolar magnético, los átomos no cuentan con un momento dipolar eléctrico permanente,

por lo que se debe inducir uno para atrapar átomos con una interacción eléctrica. Ésta inducción de momentos dipolares se puede lograr con un campo eléctrico oscilante producido por haces de luz láser con propagaciones contrarias altamente desintonizados. Una desventaja de esta trampa es que la interacción resulta más débil que en otro tipo de trampas ópticas (las profundidades son típicamente del orden de los milikelvin), con lo cual no es posible realizar en ellas el enfriamiento por evaporación y en consecuencia alcanzar la temperatura crítica para obtener el condensado de Bose-Einstein. Por esto, generalmente se utilizan las trampas magnéticas para enfriar un gas para pasarlo después a una trampa dipolar [28]. Por otro lado, una gran variedad de geometrías en una trampa dipolar son posibles, desde algo sin isotropía a un potencial de múltiples pozos.

Cuando la trampa crea un potencial periódico, se le llama red óptica debido a que la configuración es básicamente la de un cristal. Dicho de otra manera, la interferencia de los láseres forma un cristal de luz, con las ventajas de que son redes que se encuentran libres de defectos, que la forma del potencial se conoce exactamente y que los dos parámetros más importantes, la profundidad y la periodicidad, son fácilmente modificables al variar los valores de la intensidad y longitud de onda de los láseres.

En este trabajo, se utilizó la red óptica más sencilla, una red unidimensional formada por el patrón de interferencia (líneas oscuras y brillantes) de dos láseres con los haces contrapuestos.

Programa que calcula la evolución del valor de expectación de la población en la base de Fock

```
PROGRAM D2
```

```
! Este programa resuelve la ecuación de Schrödinger usando el metodo de
!diferencias finitas y calcula los valores de expectacion de las poblaciones
!de un sistema de partículas confinado en un potencial de dos pozos.
!Los casos de tres y cuatro pozos se incluyen en gris fuerte y gris claro
!respectivamente
```

```
INTEGER*4 :: Np, Nv, Nvp, M, I, J, ITf, Ra, W, Cont
REAL*8 :: U, D, Lam, St, Ti, tme, Tf, N0, N1, N2, HD, H1, H2  F1,
F2  F2, F3, F5
COMPLEX*16 :: Ci=(0.0D0,1.0D0), Sum1A=DCMPLX(0.0D0,0.0D0), Sum2A=DCMPLX,
Sum1B=DCMPLX(0.0D0,0.0D0), Sum2B=DCMPLX(0.0D0,0.0D0), &
Sum1, Sum2, CS1, CS2  Sum3A, Sum3B, Sum3, CS3  Sum3A, Sum3B, Sum3,
```

CS3, Sum4A, Sum4B, Sum4, CS4

```
REAL*8, DIMENSION (:), ALLOCATABLE :: S1, S2 S3 S3, S4  
COMPLEX*16, DIMENSION (:), ALLOCATABLE :: Psi0, Psi1, Psi2, Psi1P
```

!Damos valores a las variables

Np=1000

Nv = Np+1

Nvp=Nv+2

U=0.01D0

D=1.0D0

Lam = DBLE(Np) * U / D

St=0.001D0

Tf=2000.0D0

ITf = INT (RTf / RSt)

Ti = 0.0D0

q=1.0D0

F1=1.0D0+ 1.0D0/q

F2=1.0D0 - 1.0D0/q

q=1.0D0

k1.0D0

F2 = 1.0D0 - 1.0D0 /k

F3 = 1.0D0 + 2.0D0/q + 1.0D0/k

```
F5 = 3.0D0 + 2.0D0/q + 3.0D0/k
```

```
!Damos el estado inicial (t=0)
```

```
ALLOCATE(Psi0(Nvp))
```

```
DO I=1, Nvp
```

```
  IF(I - 1 == Ra) THEN
```

```
    Psi0(I) = DCMLPX(1.0D0,0.0D0)
```

```
  ELSE
```

```
    Psi0(I) = DCMLPX(0.0D0,0.0D0)
```

```
  ENDIF
```

```
ENDDO
```

```
!Checamos que la norma del estado inicial sea 1
```

```
NO = DOT_PRODUCT (Psi0,Psi0)
```

```
! Matrices S
```

```
! Aqui se escriben las matrices de los números de ocupación en la
```

```
!representación | N1, N2, N3 }
```

```
! Puesto que estas matrices son diagonales en la base utilizada,
```

```
!las representaremos como vectores
```

```
ALLOCATE(S1(Nv))
```

```
ALLOCATE(S2(Nv))
```

```
ALLOCATE(S3(Nv))
```

```
ALLOCATE(S3(Nv))
```

```
ALLOCATE(S4(Nv))
```

```
DO M = 1, Np + 1
```

```
    S1(I) = DBLE(M - 1) / DBLE(Np)
```

```
    S2(I) = DBLE(Np - M + 1) / DBLE(Np)
```

```
ENDDO
```

```
DO M = 1, Np + 1
```

```
    DO N = 1, Np - M + 2
```

```
        S1(I) = DBLE(M - 1) / DBLE(Np)
```

```
        S2(I) = DBLE(N - 1) / DBLE(Np)
```

```
        S3(I) = DBLE(Np - M - N + 2) / DBLE(Np)
```

```
    ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
DO L = 1, Np + 1
```

```
    DO M = 1, Np - L + 2
```

```
        DO N = 1, Np - M - L + 3
```

```
            S1(I) = DBLE(L - 1) / DBLE(Np)
```

```
            S2(I) = DBLE(M - 1) / DBLE(Np)
```

```
            S3(I) = DBLE(N - 1) / DBLE(Np)
```

```
            S4(I) = DBLE(Np - L - M - N + 3) / DBLE(Np)
```

```
        ENDDO
```

```
    ENDDO
```

```
ENDDO
```

!Escribimos los valores del Hamiltoniano y los usamos para construir Psi1P

```
ALLOCATE(Psi1P(Nvp))
```

```
Psi1P=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
```

```
I=0
```

```
DO M = 1, Np + 1
```

```
    I = I + 1
```

```
    HD = Lam * ( ( ( DBLE(M - 1))*DBLE(M - 2)) + (DBLE (Np - M  
+ 2)) *(DBLE(Np - M + 1)) ) / Np ) - 1 )
```

```
    H1 = - DSQRT (1.0D0) / 2.0D0 ) * DSQRT ( DBLE( M - 1 ) * DBLE  
( Np - M + 2 ) )
```

```
    H2 = - DSQRT (1.0D0) / 2.0D0 ) * DSQRT ( DBLE( M ) * DBLE( Np  
- M + 1 ) )
```

! Realizamos la multiplicacion H*Psi(0) a la guardamos en Psi1p

```
    Psi1P ( I + 1 ) = H1 * Psi0 ( I + 1 - 1 ) + &
```

```
    H2 * Psi0 ( I + 1 + 1 ) + &
```

```
    HD * Psi0 ( I + 1 )
```

```
ENDDO
```

```
DO M = 1, Np + 1
```

```

DO N = 1, Np - M + 2
I = I + 1

HD = Lam * ( ( ( (DBLE(M-1))*DBLE(M-2)) + (DBLE (N-1))*DBLE(N-2))
+ &

(DBLE (Np - M - N + 2)) *(DBLE(Np-M-N+1)) ) / Np ) - 1 ) - (
1.0D0 / 4.0D0) * F2 * DBLE( N - 1 )

H1 = - ( DSQRT (2.0D0) / 4.0D0 ) * F1 * DSQRT ( DBLE( M ) * DBLE
( N - 1 ) )

H2 = - ( DSQRT (2.0D0) / 4.0D0 ) * F1 * DSQRT ( DBLE( N - 1 )
* DBLE( Np - M - N + 3 ) )

H3 = - ( DSQRT (2.0D0) / 4.0D0 ) * F1 * DSQRT ( DBLE( M - 1 ) *
DBLE ( N ) )

H4 = - ( DSQRT (2.0D0) / 4.0D0 ) * F1 * DSQRT ( DBLE( Np - M
- N + 2 ) * DBLE ( N ) )

H6 = - ( 1.0D0 / 4.0D0 ) * F2 * DSQRT ( DBLE ( Np - M - N + 2
) * DBLE ( M ) )

H5 = - ( 1.0D0 / 4.0D0 ) * F2 * DSQRT ( DBLE ( M - 1 ) * DBLE
( Np - M - N + 3 ) )

```

```

Psi1P ( I + Np + 2 ) = H1 * Psi0 ( I + Np + 2 + Np - M + 1 )
+ &

H2 * Psi0 ( I + Np + 2 - 1 ) + &

H4 * Psi0 ( I + Np + 2 + 1 ) + &

H6 * Psi0 ( I + Np + 2 + Np - M + 2 ) + &

HD * Psi0 ( I + Np + 2 ) + &

H3 * Psi0 ( I + Np + 2 - Np + M - 2 ) + &

H5 * Psi0 ( I + Np + 2 - Np + M - 3 )

ENDDO

ENDDO

DO L = 1, Np + 1
  DO M = 1, Np - L + 2
    DO N = 1, Np - L - M + 3
      I = I + 1

      HD = Lam*( ( DBLE( Np-L-M-N+3)* DBLE(Np-L-M-N+2) + DBLE
(N-1)*DBLE(N-2) + DBLE (M-1)*DBLE(M-2) + DBLE(L-1)*DBLE(L-2) )/Np
)- 1) &

      - ( 1.0DO / 4.0DO ) * F2 * DBLE( N + M - 2 )

```

```

H3 = - ( DSQRT (3.0D0) / 8.0D0 ) * F3 * DSQRT ( DBLE( N )
* DBLE ( Np - N - M - L +3 ) )

```

```

H4 = - ( 1.0D0 / 8.0D0 ) * F5 * DSQRT ( DBLE( N ) * DBLE(
M - 1 ) )

```

```

H1 = - ( DSQRT (3.0D0) / 8.0D0 ) * F3 * DSQRT ( DBLE(Np - N -
M - L + 4 ) * DBLE ( N - 1 ) )

```

```

H2 = - ( 1.0D0 / 8.0D0 ) * F5 * DSQRT ( DBLE( M ) * DBLE
( N - 1 ) )

```

```

H6 = - ( DSQRT (3.0D0) / 8.0D0 ) * F3 * DSQRT ( DBLE ( M
) * DBLE ( L - 1 ) )

```

```

H5 = - ( DSQRT(3.0D0) / 8.0D0 ) * F3 * DSQRT ( DBLE ( L )
* DBLE ( M - 1 ) )

```

```

Psi1P ( I ) = HD * Psi0 ( I ) + &

```

```

H1 * Psi0 ( I - 1 ) + &

```

```

H2 * Psi0 ( I + Np - M - L + 2 ) + &

```

```

H3 * Psi0 ( I +1 ) + &

```

```
H4 * Psi0 ( I - Np + M + L - 3 ) + &
```

```
H5 * Psi0 ( I + ((Np - L + 1)*(Np - L +2)/2) ) + &
```

```
H6 * Psi0 ( I - ((Np - L + 2)*(Np - L + 3)/2) )
```

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

```
ENDDO
```

!Cálculo del estado al primer tiempo (t = step) y su normalización

```
ALLOCATE(Psi1(Nvp))
```

```
Psi1=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
```

```
Psi1 = Psi0 - St*Ci*Psi1P
```

```
N1=DOT_ PRODUCT(Psi0,Psi0)
```

```
OPEN(31, FILE = 'Ejem.dat') !Abrimos archivo para colocar los datos
```

! Primer valor medio de Si, t = 0

```
DO I = 1 , Nv
```

```
CS1 = DCONJG( Psi0 ( I + 1 ) ) * S1 ( I ) * Psi0 ( I + 1 )
```

```
Sum1A = Sum1A + CS1
```

```
CS2 = DCONJG( Psi0 ( I + 1 ) ) * S2 ( I ) * Psi0 ( I + 1 )
```

```
Sum2A = Sum2A + CS2
```

```
CS3 = DCONJG( Psi0 ( I + 1 ) ) * S3 ( I ) * Psi0 ( I + 1 )
```

```
Sum3A = Sum3A + CS3
```

```
CS3 = DCONJG( Psi0 ( I + 1 ) ) * S3 ( I ) * Psi0 ( I + 1 )
```

```
Sum3A = Sum3A + CS3
```

```
CS4 = DCONJG( Psi0 ( I + 1 ) ) * S4 ( I ) * Psi0 ( I + 1 )
```

```
Sum4A = Sum4A + CS4
```

```
ENDDO
```

```
WRITE(31,100) Ti, DREAL( Sum1A ), DREAL( Sum2A ), DSQRT(NO) DREAL(  
Sum3A ) DREAL( Sum3A ), DREAL( Sum4A )
```

! Valor medio de Si en t = Step

```
DO I = 1 , Nv
```

```
CS1 = DCONJG( Psi1 ( I + 1 ) ) * S1 ( I ) * Psi1 ( I + 1 )
```

Sum1B = Sum1B + CS1

CS2 = DCONJG(Psi1 (I + 1)) * S2 (I) * Psi1 (I + 1)

Sum2B = Sum2B + CS2

CS3 = DCONJG(Psi1 (I + 1)) * S3 (I) * Psi1 (I + 1)

Sum3B = Sum3B + CS3

CS3 = DCONJG(Psi1 (I + 1)) * S3 (I) * Psi1 (I + 1)

Sum3B = Sum3B + CS3

CS4 = DCONJG(Psi1 (I + 1)) * S4 (I) * Psi1 (I + 1)

Sum4B = Sum4B + CS4

ENDDO

WRITE(31,100) St, DREAL(Sum1B), DREAL(Sum2B), DSQRT(N1) DREAL(
Sum3B) DREAL(Sum3B), DREAL(Sum4B)

! Ya con los estados iniciales, podemos calcular cualquier otro estado

W=200 !Cada cuanto registramos la evolucion

```

Cont=0 !Contador para W
tme=St !Renombramos Step para reusarlo
ALLOCATE(Psi2(Nvp))
Psi2 = DCMLPX(0.0D0,0.0D0)

DO J=1, ITf-1 !Ciclo para calcular estados por cada paso

    Cont=Cont+1
    tme=tme+St

    I=0

    DO M = 1, Np + 1
        I = I + 1

        HD = Lam * ( ( ( DBLE(M - 1))*DBLE(M - 2)) + (DBLE (Np
- M + 2)) *DBLE(Np - M + 1)) ) / Np ) - 1 )

        H1 = - DSQRT (1.0D0) / 2.0D0 ) * DSQRT ( DBLE( M - 1 ) *
DBLE ( Np - M + 2 ) )

        H2 = - DSQRT (1.0D0) / 2.0D0 ) * DSQRT ( DBLE( M ) * DBLE(
Np - M + 1 ) )

        Psi1P ( I + 1 ) = H1 * Psi1 ( I + 1 - 1 ) + &
        H2 * Psi1 ( I + 1 + 1 ) + &
        HD * Psi1 ( I + 1 )

```

ENDDO

DO M = 1, Np + 1

DO N = 1, Np - M + 2

I = I + 1

HD = Lam * (((DBLE(M-1))*DBLE(M-2)) + (DBLE (N-1))*DBLE(N-2))
+ &

(DBLE (Np - M - N + 2)) *(DBLE(Np-M-N+1))) / Np) - 1) - (1.0D0 / 4.0D0) * F2 * DBLE(N - 1)

H1 = - (DSQRT (2.0D0) / 4.0D0) * F1 * DSQRT (DBLE(M) * DBLE (N - 1))

H2 = - (DSQRT (2.0D0) / 4.0D0) * F1 * DSQRT (DBLE(N - 1) * DBLE(Np - M - N + 3))

H3 = - (DSQRT (2.0D0) / 4.0D0) * F1 * DSQRT (DBLE(M - 1) * DBLE (N))

H4 = - (DSQRT (2.0D0) / 4.0D0) * F1 * DSQRT (DBLE(Np - M - N + 2) * DBLE (N))

H6 = - (1.0D0 / 4.0D0) * F2 * DSQRT (DBLE (Np - M - N + 2) * DBLE (M))

```

      H5 = - ( 1.0D0 / 4.0D0 ) * F2 * DSQRT ( DBLE ( M - 1 ) * DBLE
( Np - M - N + 3 ) )

```

```

      Psi1P ( I + Np + 2 ) = H1 * Psi1 ( I + Np + 2 + Np - M + 1 )
+ &

```

```

      H2 * Psi1 ( I + Np + 2 - 1 ) + &

```

```

      H4 * Psi1 ( I + Np + 2 + 1 ) + &

```

```

      H6 * Psi1 ( I + Np + 2 + Np - M + 2 ) + &

```

```

      HD * Psi1 ( I + Np + 2 ) + &

```

```

      H3 * Psi1 ( I + Np + 2 - Np + M - 2 ) + &

```

```

      H5 * Psi1 ( I + Np + 2 - Np + M - 3 )

```

```

      ENDDO

```

```

ENDDO

```

```

DO L = 1, Np + 1

```

```

  DO M = 1, Np - L + 2

```

```

    DO N = 1, Np - L - M + 3

```

```

      I = I + 1

```

```

      HD = Lam*( ( DBLE( Np-L-M-N+3)* DBLE(Np-L-M-N+2) + DBLE
(N-1)*DBLE(N-2) + DBLE (M-1)*DBLE(M-2) + DBLE(L-1)*DBLE(L-2) )/Np

```

) - 1) &

- (1.0D0 / 4.0D0) * F2 * DBLE(N + M - 2)

H3 = - (DSQRT (3.0D0) / 8.0D0) * F3 * DSQRT (DBLE(N)
* DBLE (Np - N - M - L + 3))

H4 = - (1.0D0 / 8.0D0) * F5 * DSQRT (DBLE(N) * DBLE(
M - 1))

H1 = - (DSQRT (3.0D0) / 8.0D0) * F3 * DSQRT (DBLE(Np - N -
M - L + 4) * DBLE (N - 1))

H2 = - (1.0D0 / 8.0D0) * F5 * DSQRT (DBLE(M) * DBLE
(N - 1))

H6 = - (DSQRT (3.0D0) / 8.0D0) * F3 * DSQRT (DBLE (M
) * DBLE (L - 1))

H5 = - (DSQRT(3.0D0) / 8.0D0) * F3 * DSQRT (DBLE (L)
* DBLE (M - 1))

Psi1P (I) = HD * Psi1 (I) + &

H1 * Psi1 (I - 1) + &

H2 * Psi1 (I + Np - M - L + 2) + &

```

H3 * Psi1 ( I + 1 ) + &

H4 * Psi1 ( I - Np + M + L - 3 ) + &

H5 * Psi1 ( I + ((Np - L + 1)*(Np - L + 2)/2) ) + &

H6 * Psi1 ( I - ((Np - L + 2)*(Np - L + 3)/2) )

ENDDO
ENDDO
ENDDO
Psi2 = Psi0 - St*Ci*2.0D0*Psi1P

N2=DOT_ PRODUCT(Psi0,Psi0)

Sum1=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
Sum2=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
Sum3=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
Sum3=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)
Sum4=DCMPLX(0.0D0,0.0D0)

DO I = 1 , Nv

CS1 = DCONJG( Psi2 ( I + 1 ) ) * S1 ( I ) * Psi2 ( I + 1
)

```

```

Sum1 = Sum1 + CS1

CS2 = DCONJG( Psi2 ( I + 1 ) ) * S2 ( I ) * Psi2 ( I + 1
)

Sum2 = Sum2 + CS2

CS3 = DCONJG( Psi2 ( I + 1 ) ) * S3 ( I ) * Psi2 ( I + 1 )

Sum3 = Sum3 + CS3

CS3 = DCONJG( Psi2 ( I + 1 ) ) * S3 ( I ) * Psi2 ( I + 1 )

Sum3 = Sum3 + CS3

CS4 = DCONJG( Psi2 ( I + 1 ) ) * S4 ( I ) * Psi2 ( I + 1 )

Sum4 = Sum4 + CS4

ENDDO

IF(Cont==W) THEN
WRITE(31,100) tme, DREAL( Sum1 ), DREAL( Sum2 ), DSQRT(N2) DREAL(
Sum3 ) DREAL( Sum3 ), DREAL( Sum4 )
Cont=0
ENDIF

```

```
Psi0=Psi1 !Renonmbamos para reutilizarlas
```

```
Psi1=Psi2
```

```
ENDDO
```

```
100 FORMAT( 5( 1X , F20.10 , 1X ) )
```

```
CLOSE(UNIT=31)
```

```
ENDPROGRAM D2
```

Programa que calcula los eigenvalores y eigenvectores del Hamiltoniano

(*CÁLCULO DE LOS EIGENESTADOS Y EIGENVALORES DEL HAMILTONIANO PARA UNA POTENCIAL DE DOS, TRES (GRIS OSCURO) Y CUATRO (GRIS CLARO) POZOS*)

(*Nt es el numero total de particulas*)

```
Nt = 100;
```

(*El operador de número en el pozo 2, normalizado de tamaño (Nt +1) (Nt +1)*(Nt +2)/2 (Nt +1)*(Nt +2)*(Nt +3)/6 *)

```
n2 = SparseArray[{Band[{1, 1}] -> Table[(Nt - n)/Nt, {n, 1, Nt + 1}]}], Nt + 1];
```

```
n2 = SparseArray[{Band[{1, 1}] -> Flatten[Table[(j)/Nt, {i, 0, Nt}, {j, 0, Nt - i}]}], (Nt + 1)*(Nt + 2)/2];
```

```
n2 = SparseArray[{{Band[{{1, 1}}] → Flatten[Table[{{j)/Nt, {i, 0, Nt},
{j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j}}]}}, (Nt+ 1) (Nt + 2) (Nt + 3)/6]
;}
```

(*Usamos valores para Δ y U ... $\Delta = 1$ equivale a adimensionalizar las energías y tiempo con Δ ... U es el valor Λ^*)

```
 $\Delta = 1.0;$ 
```

```
 $U = 0.1;$ 
```

(*h es el Hamiltoniano de dimensión $(Nt + 1)$ $(Nt + 1)*(Nt + 2)/2$ $(Nt + 1)*(Nt + 2)*(Nt+3)/6$, escrito como suma de matrices tipo banda*)

```
h=SparseArray[
```

```
{Band[{{2, 1}}] → Table[  $-\frac{\Delta}{2}\sqrt{(Nt - n)(n + 1)}$ , {n, 0, Nt - 1} ],
```

```
Band[{{1, 1}}] → Table[  $\frac{U}{Nt}(((Nt - n - 1)(Nt - n)) +$ 
```

```
 $((n - 1)n) - Nt)$ , {n, 0, Nt} ],Band[{{1, 2}}] →
```

```
Table[  $-\frac{\Delta}{2}\sqrt{(Nt - n)(n + 1)}$ , {n, 0, Nt - 1} ] }, Nt + 1 ];
```

```
d = Flatten [ Table [  $i$ , { $i$ , 0,  $Nt$ }, { $j$ , 0,  $Nt - i$ } ] ];
```

```
s = Flatten [ Table [  $-\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\sqrt{j(i+1)}$ , { $i$ , 0,  $Nt$ },
```

```
{ $j$ , 0,  $Nt - i$ } ] ];
```

```
hi = SparseArray [ {{ $i_{-}, j_{-}$ } /;  $j == i - d[[i]] + Nt \rightarrow s[[i]]$ },
```

```
{ $(Nt + 1)(Nt + 2)/2$ ,  $(Nt + 1)(Nt + 2)/2$ } ];
```

```
hj = SparseArray [ {{ $i_{-}, j_{-}$ } /;  $j == i - Nt + d[[j]] \rightarrow s[[j]]$ },
```

```
{ $(Nt + 1)(Nt + 2)/2$ ,  $(Nt + 1)(Nt + 2)/2$ } ];
```

```
hb=SparseArray[
```

```
{Band[{2, 1}]  $\rightarrow$ 
```

```
Flatten [ Table[  $-\frac{\Delta}{2}\sqrt{(Nt - i - j)(j + 1)}$ , { $i$ , 0,  $Nt - 1$ },
```

```
{ $j$ , 0,  $Nt - i$ } ] ],
```

```
{Band[{1, 1}]  $\rightarrow$ 
```

Flatten [

Table[

$\frac{U}{Nt}(((Nt - i - j)(Nt - i - j - 1)) + ((i - 1)i) +$

$((j - 1)j) - Nt), \{i, 0, Nt\}, \{j, 0, Nt - i\}]] ,$

Band[{1, 2}] →

Flatten [Table[$-\frac{\Delta}{2} \sqrt{(Nt - i - j)(j + 1)}$, $\{i, 0, Nt - 1\}$,

$\{j, 0, Nt - i\}]] , (Nt + 1)(Nt + 2)/2] ;$

h=hi+hj+hb

e = Flatten [Table [$i, \{i, 0, Nt\}, \{j, 0, Nt - i\}$,

$\{k, 0, Nt - i - j\}]] ;$

r = Flatten [Table [$-\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \sqrt{j(i + 1)}$, $\{i, 0, Nt\}$,

$\{j, 0, Nt - i\}, \{k, 0, Nt - i - j\}]]$;

$d = \text{Flatten} [\text{Table} [i + j, \{i, 0, Nt\},$

$\{j, 0, Nt - i\}, \{k, 0, Nt - i - j\}]]$;

$e = \text{Flatten} [\text{Table} [-\sqrt{k(j+1)}, \{i, 0, Nt\}, \{j, 0, Nt - i\},$

$\{k, 0, Nt - i - j\}]]$;

$hi = \text{SparseArray}[$

$\{ \{i_-, j_-\} /; j == i + \left[\frac{(Nt - e[[i]) + 1)(Nt - e[[i]) + 2}{2} \right] \rightarrow r[[j]] \},$

$\{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6\}]$;

$hj = \text{SparseArray}[$

$\{ \{i_-, j_-\} /; j == i - \left[\frac{(Nt - e[[i]) + 1)(Nt - e[[i]) + 2}{2} \right] \rightarrow r[[i]] \},$

$\{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6\}]$;

```
hk = SparseArray [ {{i_., j_} /; j == i - d[[i]] + Nt -> s[[i]]},
{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6} ];
```

```
hl = SparseArray [ {{i_., j_} /; i == j + Nt - d[[j]] -> s[[j]]},
{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6} ];
```

```
hb=SparseArray[
```

```
{Band[{2, 1}] ->
```

```
Flatten [ Table[ -  $\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \sqrt{(Nt - i - j - k)(k + 1)}$ ,
```

```
{i, 0, Nt - 1}, {j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ],
```

```
{Band[{1, 1}] ->
```

```
Flatten [
```

```
Table[
```

```
 $\frac{U}{Nt}(((Nt - i - j - k)(Nt - i - j - k - 1)) + ((i - 1)i) +$ 
```

```
 $((j - 1)j) + ((k - 1)k) - Nt), \{i, 0, Nt\},$ 
```

```
{j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ],
```

```
{Band[{1, 2}] →
```

```
Flatten [ Table[ -  $\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \sqrt{(Nt - i - j - k)(k + 1)}$ ,
```

```
{i, 0, Nt - 1}, {j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ] },
```

```
(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6 ];
```

```
h=hi+hj+hb
```

(*Calculamos los eigenvalores de h ... los da en orden descendente de valor absoluto*)

```
ev = Eigenvalues[h];
```

(*Ordenamos los eigenvalores en orden ascendente sin valor absoluto ... estan son las eigenenergias desde el estado base hasta el mas excitado*)

```
eval = Sort[ev];
```

(*El siguiente vector nos da el indice del orden*)

```
or = Ordering[ev];
```

(*Calculamos los eigenvectores de h ... estan en orden original descendente en valor absoluto de sus eigenvalores ... ya estan normalizados*)

```
evc = Eigenvectors[h];
```

(*Ordenamos los eigenvectores en el mismo orden que los eigenvalores*)

```
evvec = Table[evc[[or[[i]]]], {i, 1, Nt + 1}];
```

(*Por lo tanto, en el arreglo eval tenemos los eigenvalores y en evvec los correspondientes eigenvectores, ordenados del estado base hasta el mas excitado*)

(*Se grafica los eigenvalores, cada uno con su correspondiente eigenvector*)

```
nB01 =
```

```
ListPlot[Table[{ eval[[n]]/Nt, evvec[[n]].n2.evvec[[n]] } ,
```

```
{ n, 1, (Nt + 1)} { (Nt+1)(Nt + 2)/2 } { (Nt+1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6 } ],
```

```
PlotRange →
```

```
{ { eval[[1]]/Nt, eval[[Nt + 1]]/Nt  eval[[Nt+1)(Nt + 2)/2]]  
eval[[Nt+1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6]] }, { 0, 1} },
```

```
Frame → True, FrameTicks → { { All, None} , { All, None} } ,
```

```
PlotStyle → Directive[Red],
```

```
FrameLabel → { Style[ $\epsilon_N/N$ ,18], Style[ $N_2/N$ ,18]}
```

```
RotateLabel → False, AxesOrigin → {-0.45, 0} ,
```

```
Axes → False, ImageSize → 500]
```

Programa que calcula la evolución de los elementos no diagonales de la matriz de densidad

(*CÁLCULO DE LA EVOLUCIÓN DE LOS ELEMENTOS NO DIAGONALES DE LA MATRIZ DE DENSIDAD*)

(*Nt es el número total de partículas*)

Nt = 10;

(*Condición inicial para la función de onda*)

Clear[r];

psii = Array[r, {(Nt + 1) (Nt + 1) (Nt + 2)/2 (Nt + 1) (Nt + 2) (Nt + 3)/6}];

```
Do[r[i] = 0, {i, 1, (Nt + 1) (Nt + 1) (Nt + 2)/2 (Nt + 1) (Nt + 2) (Nt + 3)/6}];
```

```
r[1] = 1;
```

```
psi = psii/Sqrt[Conjugate[psii].psii];
```

(*El cálculo de la evolución se hace para diferentes valores de la interacción U*)

```
Do[{ Clear[U]; Δ =1.0;U =0.1*L;
```

(*Se calcula el Hamiltoniano para cada valor de la interacción*)

```
h=SparseArray[
```

```
{Band[{2, 1}] → Table[ -  $\frac{\Delta}{2} \sqrt{(Nt - n)(n + 1)}$ , {n, 0, Nt - 1} ],
```

```
Band[{1, 1}] → Table[  $\frac{U}{Nt} (((Nt - n - 1)(Nt - n)) +$ 
```

```
 $((n - 1)n) - Nt)$ , {n, 0, Nt} ],Band[{1, 2}] →
```

```
Table[ -  $\frac{\Delta}{2} \sqrt{(Nt - n)(n + 1)}$ , {n, 0, Nt - 1} ] }, Nt + 1];
```

```
d = Flatten [ Table [i, {i, 0, Nt} , {j, 0, Nt - i} ]];
```

```

s = Flatten [Table [ -  $\frac{\Delta}{\sqrt{2}}\sqrt{j(i+1)}$ , {i, 0, Nt},
{j, 0, Nt - i} ] ];

hi = SparseArray [ {{i-, j-} /; j == i - d[[i]] + Nt → s[[i]]},
{(Nt + 1)(Nt + 2)/2, (Nt + 1)(Nt + 2)/2} ];

hj = SparseArray [ {{i-, j-} /; j == i - Nt + d[[j]] → s[[j]]},
{(Nt + 1)(Nt + 2)/2, (Nt + 1)(Nt + 2)/2} ];

hb=SparseArray[
{Band[{2, 1}] →
Flatten [ Table[ -  $\frac{\Delta}{2}\sqrt{(Nt - i - j)(j + 1)}$ , {i, 0, Nt - 1},
{j, 0, Nt - i} ] ],
{Band[{1, 1}] →

```

Flatten [

Table[

$\frac{U}{Nt}(((Nt - i - j)(Nt - i - j - 1)) + ((i - 1)i) +$

$((j - 1)j) - Nt), \{i, 0, Nt\}, \{j, 0, Nt - i\}]] ,$

Band[{1, 2}] →

Flatten [Table[$-\frac{\Delta}{2}\sqrt{(Nt - i - j)(j + 1)}$, {i, 0, Nt - 1},

{j, 0, Nt - i}]]], (Nt + 1)(Nt + 2)/2] ;

h=hi+hj+hb

e = Flatten [Table [i, {i, 0, Nt}, {j, 0, Nt - i},

{k, 0, Nt - i - j}]] ;

r = Flatten [Table [$-\frac{\sqrt{3}\Delta}{2}\sqrt{j(i + 1)}$, {i, 0, Nt},

{j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j}]] ;

```

d = Flatten [ Table [ i + j, {i, 0, Nt},
{j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ];

e = Flatten [Table [ -√k(j + 1), {i, 0, Nt}, {j, 0, Nt - i},
{k, 0, Nt - i - j} ] ];

hi=SparseArray[
{ {i-, j-} /; j == i + [(Nt-e[[i]+1)(Nt-e[[i]+2)]/2] → r[[j]] },
{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6} ];

hj=SparseArray[
{ {i-, j-} /; j == i - [(Nt-e[[i]+1)(Nt-e[[i]+2)]/2] → r[[i]] },
{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6} ];

hk = SparseArray [ { {i-, j-} /; j == i - d[[i]] + Nt → s[[i]] },

```

$\{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6\}$];

h1 = SparseArray [$\{\{i_-, j_-\} /; i == j + Nt - d[[j]] \rightarrow s[[j]]\}$],

$\{(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6, (Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6\}$];

hb=SparseArray[

{Band[{2, 1]} →

Flatten [Table[$-\frac{\sqrt{3}\Delta}{2}\sqrt{(Nt - i - j - k)(k + 1)}$,

$\{i, 0, Nt - 1\}, \{j, 0, Nt - i\}, \{k, 0, Nt - i - j\}$]],

{Band[{1, 1]} →

Flatten [

Table[

$\frac{U}{Ni}(((Nt - i - j - k)(Nt - i - j - k - 1)) + ((i - 1)i) +$

$((j - 1)j) + ((k - 1)k) - Nt), \{i, 0, Nt\},$

```
{j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ]],
```

```
{Band[{1, 2}] →
```

```
Flatten [ Table[ -  $\frac{\sqrt{3}\Delta}{2} \sqrt{(Nt - i - j - k)(k + 1)}$ ,
```

```
{i, 0, Nt - 1}, {j, 0, Nt - i}, {k, 0, Nt - i - j} ] ] ],
```

```
(Nt + 1)(Nt + 2)(Nt + 3)/6 ];
```

```
h=hi+hj+hb
```

(*Se calculan sus eigenvalores y eigenvectores*)

```
ev = Eigenvalues[h];
```

```
eval = Sort[ev];
```

```
or = Ordering[ev];
```

```
evc = Eigenvectors[h];
```

```
vec = Table[evc[[or[[i]]]], {i, 1, (Nt + 1) (Nt + 2)/2 (Nt +
```

1) $(Nt + 2) (Nt + 3)/6$];

(*Coeficientes de psi en la base de eigenvectores*)

an = Table[Conjugate[evec[[n]]].psi, {n, 1, (Nt + 1) (Nt + 2)/2
(Nt + 1) (Nt + 2) (Nt + 3)/6}];

(* Escribimos los operadores de un cuerpo en forma matricial. Es decir, escribimos los elementos de la matriz de densidad reducida de un cuerpo fuera de la diagonal (en particular rho21 rho31 rho31)*)

Ob2db1=SparseArray[Band[{ 2,1}]→ Table[$-(\Delta/2) \sqrt{(Nt - n)(n + 1)}$,
{ n,0,Nt-1}],Nt+1];

b = Flatten[Table[i, { i, 0, Nt }, { j, 0, Nt - i}]];

o = Flatten[Table[$\sqrt{((Nt - i - j)(i + 1))}$, {i, 0, Nt}, {j, 0, Nt - i},
{k, 0, Nt - i - j}]]];

Ob3db1 = SparseArray[{ {i-,j-} /; j == i - b[[j]] + Nt + 2 → o[[j]]

, {(Nt + 1)(Nt + 2)/2, (Nt + 1)(Nt + 2)/2}];

p=Flatten [Table [$\sqrt{k(i + 1)}$,

```
{i,0,Nt} , { j,0,Nt-i} , {k,0, Nt-i-j} ]];
```

```
Ob3db1=SparseArray[
```

```
{ { i_.,j_} /; j==i + (1/2 (Nt - e[[i]])(Nt - e[[i]] + 1)) +
```

```
(Nt-d[[i]])→ p[[i]]}, { (Nt+1)(Nt+2)(Nt+3)/6,
```

```
(Nt+1)(Nt+2)(Nt+3)/6}];
```

(*Tf es el tiempo final*)

```
Tf = 500;
```

(*Se calcula la evolución del estado inicial con el operador de evolución*)

```
psit =
```

```
Table[ $\sum_{j=1}^{Nt+1} \sum_{j=1}^{(Nt+1)(Nt+2)/2} \sum_{j=1}^{(Nt+1)(Nt+2)(Nt+3)/6} \text{an}[[j]]*$ 
```

```
exp-ieval[[j]]*n*evec[[j]], { n,1,Tf} ];
```

(*La evolución de la matriz de densidad*)

```
rhot = Table[Outer[Times, psit[[n]], Conjugate[psit[[n]]]], {n, 1,
```

```
Tf}];
```

(* Tomamos la traza del producto de la matriz de densidad de las N_t partículas por el operador de un cuerpo para cada valor de la interacción*)

```
If[L == 1, vmd0b3db1L1 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 2, vmd0b3db1L2 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 3, vmd0b3db1L3 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 4, vmd0b3db1L4 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 5, vmd0b3db1L5 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 6, vmd0b3db1L6 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 7, vmd0b3db1L7 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];
```

```
If[L == 8, vmd0b3db1L8 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
```

0];

If[L == 9, vmd0b3db1L9 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 10, vmd0b3db1L10 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 11, vmd0b3db1L11 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 12, vmd0b3db1L12 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 13, vmd0b3db1L13 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 14, vmd0b3db1L14 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 15, vmd0b3db1L15 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 16, vmd0b3db1L16 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 17, vmd0b3db1L17 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

```

0];

If[L == 18, vmd0b3db1L18 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 19, vmd0b3db1L19 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 20, vmd0b3db1L20 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 21, vmd0b3db1L21 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 22, vmd0b3db1L22 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 23, vmd0b3db1L23 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 24, vmd0b3db1L24 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 25, vmd0b3db1L25 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,
0];

If[L == 26, vmd0b3db1L26 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,

```

```
0];
```

```
If[L == 27, vmd0b3db1L27 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,  
0];
```

```
If[L == 28, vmd0b3db1L28 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,  
0];
```

```
If[L == 29, vmd0b3db1L29 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,  
0];
```

```
If[L == 30, vmd0b3db1L30 = Table[Tr[rhot[[n]].0b3db1], {n, 1, Tf}];,  
0];}, {L, 1, 30}]
```

(*Se colocan los valores de la interacción en una tabla para poder graficar*)

```
G = Table[0.1*L, {L, 1, 30}];
```

(*Se colocan los valores del elemento no diagonal de la matriz de densidad para cada interacción en una tabla para poder graficar*)

```
Rho31 = Re[{vmd0b3db1L1, vmd0b3db1L2, vmd0b3db1L3,
```

```
vmd0b3db1L4, vmd0b3db1L5, vmd0b3db1L6, vmd0b3db1L7,
```

```
vmd0b3db1L8, vmd0b3db1L9, vmd0b3db1L10, vmd0b3db1L11,
```

```
vmd0b3db1L12, vmd0b3db1L13, vmd0b3db1L14, vmd0b3db1L15,  
vmd0b3db1L16, vmd0b3db1L17, vmd0b3db1L18, vmd0b3db1L19,  
vmd0b3db1L20, vmd0b3db1L21, vmd0b3db1L22, vmd0b3db1L23,  
vmd0b3db1L24, vmd0b3db1L25, vmd0b3db1L26, vmd0b3db1L27,  
vmd0b3db1L28, vmd0b3db1L29, vmd0b3db1L30}]/Nt;
```

```
MAX = Max[Rho31];
```

```
MIN = Min[Rho31];
```

(*Se colocan todos los datos en una sola tabla*)

```
data = Table[0, {i, 1, Tf*30}];
```

```
Do[Do[data[[n + M - Tf + (Tf - 1)*M]] =
```

```
{G[[M]], n, Rho31[[M]][[n]]}, {n, 1, Tf}], {M, 1, 30}];
```

```

ListPlot3D[data,Mesh→None,PlotRange→All,

ColorFunction→ Rainbow ,Mesh→None,

AxesLabel→ { Style[Λ,FontSize→ 20,Black],

Style[t,FontSize→ 20,FontWeight→Plain,Black] },

PlotLabel→Style[
rho13,FontSize→ 20,Black],

BaseStyle→ { FontFamily→ Times ,FontSize→12} ,

PlotRange→{ { 0,3} ,{ 0,Tf} ,{ MAX,MIN} } ]

```

Bibliografía

- [1] METCALF, H. Y VAN DER STRATEN, P., *Laser Cooling and Trapping*, Springer-Verlag New York (1999).
- [2] KASEVICH, M. Y CHU, S., “Laser cooling below a photon recoil with three-level atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1741-1744 (1992).
- [3] LANDAU, L. Y LISHITZ, L., *Mechanics, Non Relativistic Theory*, Pergamon London (1992).
- [4] COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B. Y LALOE, F., *Quantum Mechanics*, Wiley-Interscience (1992).
- [5] GRIMM, R.; WEIDEMÜLLER, M. Y OVCHINNIKOV, Y., “Optical dipole traps for neutral atoms”, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **42**, 95-170 (2000)
- [6] JACKSON, J.D., *Classical Electrodynamics*, Wiley, New York (1962).
- [7] GREINER, M.; MANDEL, O.; ESSLINGER, T.; HÄNCH, T.W. Y BLOCH, I., “Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms”, *Nature* **415**, 39-44 (2002)
- [8] GREINER, M.; BLOCH, I.; MANDEL, O.; HÄNCH, T.W. Y ESSLINGER, T., “Bose-Einstein condensates in 1D- and 2D optical lattices”, *Appl. Phys. B* **73**, 769-772 (2001)

- [9] ALBIEZ, M.; GATI, R.; FÖLLING, J.; HUNSMANN, S.; CRISTIANI, M. Y OBERTHALER, M.K., “Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic Josephson junction”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 010402 (2005)
- [10] ANDERSON, M.H.; ENSHER, J.R.; MATTHEWS, M.R.; WIEMAN, C.E. Y CORNELL, E.A., “Observation of Bose-Einstein Condensation in a dilute atomic vapor”, *Science* **269**, 198-201 (1995)
- [11] DAVIS, K.; MEWES, M-O.; ANDREWS, M.; VAN DRUTEN, M.; DURFEE, D.; KURN, D. Y KETTERLE, W., “Bose-Einstein Condensation in a gas of sodium atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969-3973 (1995)
- [12] BRADLEY, C.C.; SACKETT, C.A.; TOLLET, J.J. Y HULET, R.G., “Evidence of Bose-Einstein Condensation in an atomic gas with attractive interactions”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687-1690 (1995)
- [13] ANDREWS, M.R.; TOWNSEND, C.G.; MIESNER, H-J.; DURFEE, D.S.; KURN, D.M. Y KETTERLE, W., “Observation of interference between two Bose Condensates”, *Science* **275**, 637-641 (1997)
- [14] JAKSCH D., BRUDER C., CIRAC J.I., GARDINER C.W. AND ZOLLER P., “Cold bosonic atoms in optical lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108-3111 (1998)
- [15] WILLIAMS, J.; WALSER, R.; COOPER, J.; CORNELL, E.A. Y HOLLAND, M., “Excitation of a dipole topological state in a strongly coupled two-component Bose-Einstein Condensate”, *Phys. Rev. A* **61**, 033612 (2000)
- [16] MATHEWS, M.R.; ANDERSON, B.P.; HALJAN, P.C.; HALL, D.S.; HOLLAND, M.J.; WILLIAMS, J.E.; WIEMAN, C.E. Y CORNELL, E.A.,

- “Vortices in a Bose-Einstein Condensate”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2498-2501 (1999)
- [17] DALFOVO, F.; GIORGINI, S.; PITAEVSKII, L.P. Y STRINGARI, S., “Theory of Bose-Einstein Condensation in trapped gases”, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463-512 (1999)
- [18] LEGGETT A.J., “Bose-Einstein Condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts”, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 307-356 (2001)
- [19] FISHER, M.P.A.; WEICHMAN, P.B.; GRINSTEIN, G. Y FISHER, D.S., “Boson localization and the superfluid-insulator transition”, *Phys. Rev. B* **40**, 546-570 (1989)
- [20] FREERICKS, J.K. Y MONIEN, H., “Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model”, *Phys. Rev. B* **53**, 2691-2700 (1996)
- [21] LETT, P.D.; WATTS, R.N.; WESTBROOK, C.I.; PHILLIPS, W.D.; GOULD, P.L. Y METCALF, H.J., “Observation of atoms laser cooled below the Doppler limit”, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 169-172 (1988)
- [22] DALIBARD, J. Y COHEN-TANNOUDJI, C., “Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models”, *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2023-2045 (1989)
- [23] ASPECT, A.; ARIMONDO, E.; KAISER, R.;VANSTEENKISTE, N. Y COHEN-TANNOUDJI, C., “Laser cooling below the one-photon recoil energy by velocity selective coherent population trapping - Theoretical analysis”, *J. Opt. Soc. Am. B* **6**, 2112-2124 (1989)

- [24] MASUHARA, N.; DOYLE, J.M.; SANDBERG, J.C.; KLEPPNER, D.; GREYTAK, T.J.; HESS, H.F. Y KOCHANSKI, G.P., “Evaporative cooling of spin-polarized atomic hydrogen”, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 935-938 (1988)
- [25] BERGSTRÖM, I.; CARLBERG, C. Y SCHUCH, R., *Trapped charged particles and fundamental applications*, World Scientific, Singapore (1995)
- [26] CHU, S.; BJORKHOLM, J.E.; ASHKIN, A. Y CABLE, A., “Experimental observation of optically trapped atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 314-317 (1986)
- [27] BERGEMAN, T.; EREZ, G. Y METCALF, H.J., “Magnetostatic trapping fields for neutral atoms”, *Phys. Rev. A* **35**, 1535-1546 (1987)
- [28] GUIDONI, L.; TRICHE, C.; VERKERK, P. Y GRYNBERG, G., “Quasiperiodic optical lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3363-3366 (1997)
- [29] BOUWMEESTER, D.; EKERT, A.K. Y ZEILINGER, A., *The Physics of Quantum Information: Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation*, Springer, Berlin (2000)
- [30] BARTENSTEIN, M.; ALTMAYER, A.; RIEDL, S.; JOCHIM, S.; CHIN, C.; DENSCHLAG, J.H. Y GRIMM, R., “Crossover from a molecular Bose-Einstein Condensate to a Degenerate Fermi Gas”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 120401 (2004)
- [31] BARANOV, M.; DOBREK, L.; GORAL, K.; SANTOS, L. Y LEWENSTEIN, M., “Ultracold dipolar gases – a challenge for experiments and theory”, *Phys. Scripta* **102**, 74-81 (2002)

- [32] STENHOLM, S., “The semiclassical theory of laser cooling”, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 699-739 (1986)
- [33] CHU, S., “Nobel lecture: The manipulation of neutral particles”, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 685-706 (1998)
- [34] MORLET GUEVARA, E., *Dinámica de un gas de bosones ultrafrío, confinado en un potencial unidimensional simétrico*, Tesis de licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM (2005)
- [35] FEIT, M.D.; FLECK, J.A. Y STEIGER, A., “Solution of the Schrödinger equation by a spectral method”, *J. Comput. Phys.* **47**, 412-433 (1982)
- [36] ROSE, M.E., *Elementary Theory of Angular Momentum*, Jhon Wiley and Sons, New York (1957)
- [37] BLOCH, I.; HÄNSCH, T.W. Y ESSLINGER, T., “Measurement of the spatial coherence of a trapped Bose gas at the phase transition”, *Nature* **403**, 166-170 (2000)