## Ingeniería de vórtices en condensados de Bose-Einstein

Tesis de Maestría

MARCELO LOZADA HIDALGO Asesor: Dr. Víctor Romero Rochín

> Comité Tutoral: Dr. Víctor Romero Rochín Dr. Mayo Villagrán Muniz Dr. Julio Martinell Benito

31 de agosto de 2012



INSTITUTO DE FÍSICA Universidad Nacional Autónoma de México



Universidad Nacional Autónoma de México



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.

# Índice general

1.	Introducción	<b>2</b>
	1.1. Los condensados de Bose-Einstein clásicos	4
	1.2. Condensados interactuantes y la ecuación de Gross-Pitaevskii	6
	1.2.1. Interacción interatómica y la aproximación de contacto $\ .$	6
	1.2.2. La ecuación de Gross-Pitaevskii	8
	1.5. Aspectos experimentales sobre commannento y eminamiento de	0
	1.2.1 La trampa magnete áptica y al desaclarador Zaeman	10
	1.3.1. La trampa magneto oprica y el desacelerador Zeeman	10
	1.5.2. Eminamento poi evaporación	12
2.	Vórtices en condensados rotantes	14
	2.1. Condensados de Bose-Einstein en trampas armónicas estáticas .	14
	2.2. Condensados de Bose-Einstein en trampas armónicas rotantes	15
3.	Ingeniería de vórtices	20
	3.1. Propiedades magnéticas de átomos alcalinos e hidrógeno	20
	3.2. Modelo sin interacción interatómica	24
	3.3. Modelo con interacción interatómica	27
	3.3.1. Ejemplos	28
	3.3.2. Explicación semianalítica	37
	3.3.3. Campos multipolares y control de la carga del vórtice	41
4.	Líneas de investigación futura	47
	4.1. Estabilidad	47
	4.2. Carga semientera	48
	4.3. Potenciales dependientes del tiempo	49
	4.4. Turbulencia y computación cuántica	50
5.	Conclusiones	<b>52</b>

## Capítulo 1

## Introducción

La formación de vórtices es el sello de los superfluidos bosónicos o fermiónicos[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7]. Por esta razón, el fenómeno de formación de vórtices juega un papel central en nuestro entendimiento de los superfluidos, en particular, de los gases atómicos ultrafríos.

La primera evidencia de formación de vórtices en gases ultrafríos fue la predicción de Abrikosov[8], y posterioremente la observación experimental de Essman y Trauble[9], de redes triangulares de vórtices en superconductores de tipo II. A partir de entonces se han observado estas mismas redes en condensados de Bose-Einstein en trampas rotantes. Las primeras en observarse fueron en helio líquido[10, 11] y, posteriormente, en gases atómicos, también con el mismo patrón triangular. En los últimos años se han desarrollado otras formas de nuclear vórtices como la impresión de fase («phase imprinting»)[12] y, recientemente, la creación de campos de norma artificial[13, 14].

Nosotros proponemos otra forma más, una que requiere la presencia de grados internos de libertad en el átomo. La novedad de nuestra propuesta es que, a diferencia de los otros esquemas, permite la creación de los vórtices en donde se desee y con la circulación que se desee. Es decir, nuestra propuesta, a diferencia de las demás, no sólo permite crear los vórtices sino que permite controlarlos a voluntad. Nos permite hacer ingeniería de vórtices.

La esencia de la creación de vórtices en nuestra propuesta es la misma que en el trabajo de Abrikosov[8]. En superconductores tipo II, los vórtices se forman en los lugares donde el campo magnético logra penetrar el material[15]. En esos vórtices (o tubos de flujo) la densidad de pares de Cooper es cero y la corriente superconductora circula para anular el campo magnético en el bulto. En nuestra propuesta la situación es similar, excepto que trabajamos con funciones de onda con varias componentes y, a diferencia de Abrikosov, trabajamos con campos magnéticos no uniformes.

Encontramos que los vórtices no se forman donde el campo penetra sino en los puntos donde es exactamente cero. Además, los vórtices no se forman en todas las componentes de la función de onda. Es decir, si un vórtice se nuclea en un punto espacial de alguna de las componentes, entonces en otra de las componentes no se nucleará un vórtice en ese punto espacial, sino que se generará una acumulación de densidad de tal suerte que se cancelen los vórtices en las otras componentes, dejando así la densidad total inalterada en su forma tipo gaussiana. De esta forma, los vórtices se nuclearán en donde se desee al escoger un campo magnético que sea cero en los lugares donde se generarán los vórtices, mas no en todas las componentes de spin.

Este resultado tiene consecuencias interesantes. La primera es que los vórtices pueden ser nucleados con la circulación (o carga como también se le llama a la circulación del vórtice) entera, q = 1, 2, 3..., que se desee seleccionando un campo magnético con orden mulitpolar adecuado; los campos dipolares generan vórtices con carga q = 1, los cuadrupolares q = 2, etcétera. Otra consecuencia interesante de nuestra propuesta es que nos permite ensamblar redes de vórtices a voluntad simplemente creando campos magnéticos con ceros en los nodos de la red.

La propuesta está organizada de la siguiente forma. La primera sección es una introducción a los condensados de Bose-Einstein (BEC), incluyendo la ecuación básica de modelación del sistema; a saber, la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). En la siguiente introducimos el condensado rotante y la solución que obtuvimos utilizando los métodos numéricos que se encuentran en la literatura.

Hasta este punto sólo hemos repetido resultados existentes con el propósito de comparar nuestros resultados con los ya aceptados, pero el punto central de esta propuesta es el control de los vórtices. Así, planteamos el sistema físico con el que trabajamos y, antes de entrar a la solución de este modelo, analizamos una simplificación de éste en la que no se toma en cuenta la interacción interatómica. Finalmente, presentamos nuestro modelo completo.

Antes de empezar con el trabajo, debido a que el nombre de mi equipo de trabajo (Dr. Víctor Romero Rochín, Roberto Zamora Zamora y el Dr. Santiago Caballero Benítez) no aparece formalmente en la tesis, consideramos esencial especificar claramente qué hizo cada miembro del equipo. Con este fin, veamos la línea de tiempo del trabajo usando las abreviaciones VRR, RZZ y SCB. Quiero destacar que la contribución de todos estuvo en todo momento entrelazada y que sin el intercambio de ideas y resultados no habríamos logrado lo que hicimos.

Este proyecto empezó en febrero del 2011 cuando nos reunimos por primera vez. Como no conocíamos el tema, el Dr. VRR, a manera de entrenarnos, nos asignó dos tareas: la primera, resolver la ecuación de GP unicomponente en sistemas de referencia fijos; la segunda, para sistemas rotantes. Estas tareas las hicimos RZZ y yo independientemente con ayuda del Dr. SCB. El siguiente paso fue introducir la GP multicomponente sin el término no lineal, para ello, el Dr. VRR nos asignó resolver la ecuación de dos formas distintas, yo escogí resolverla usando elemento finito. El siguiente paso fue introducir el término no lineal en la GP. Intentamos varios métodos con ayuda del Dr. SCB. De nuevo, RZZ y yo resolvimos la ecuación en paralelo.

En este punto, usando el código de RZZ, el Dr. VRR y RZZ descubrieron que los vórtices se nucleaban a voluntad en los ceros del campo magnético. ¿Pero por qué? ¿sería coincidencia del campo particular que usamos? Así, el Dr. VRR ideó un campo hecho con 8 cables infinitos que tenía tres ceros. El resultado fue el mismo: tres vórtices. En este punto, mi trabajo fue encontrar más campos magnéticos tanto para ejemplificar como para encontrar contraejemplos. El Dr. VRR se dio a la tarea de encontrar la explicación. Fue él, quien leyendo Abrikosov encontró la explicación semianalítica.

Yo seguía con los campos magnéticos. La idea era encontrar campos cuyos ceros pudiéramos controlar. Fue con este trabajo que me di cuenta de que la carga total de los vórtices en el condensado estaba determinada por el orden multipolar del campo. Así pues, ahora podíamos controlar no sólo la posición sino la carga. También en este punto descubrí que podíamos ensamblar redes de vórtices con nuestro método. RZZ confirmó numéricamente ambas predicciones y además se dio cuenta de que en las redes periódicas las cargas de los vórtices alternaban de signo. Usando nuestro trabajo anterior, encontré la explicación del fenómeno.

Estos son básicamente nuestros resultados y con eso termina la línea del tiempo de nuestro proyecto. Naturalmente, estoy dejando fuera muchos intercambios de ideas y resultados que hicieron esto posible. Todos los resultados numéricos que cito en el capítulo uno y dos de esta tesis los hice yo, al igual que los resultados del problema lineal en el capítulo tres. El resto de los resultados numéricos que cito en el capítulo tres (los del problema no lineal) fueron obtenidos por RZZ aunque yo también generé resultados para este problema. Las figuras de la referencia[16] las hizo el Dr. SCB con los datos de RZZ.

Por último, las referencias [1] a [30] son referidas directamente en el texto, mientras que las referencias [31] a [51] no. Estas últimas fueron incluídas en la bibliografía porque fueron referencias consultadas que enriquecieron el trabajo a pesar de que no son referencias directas.

### 1.1. Los condensados de Bose-Einstein clásicos

Consideremos un gas de bosones en equilibrio termodinámico a temperatura T y bajo un potencial químico  $\mu$ . Sea  $\epsilon_{\nu}$  la energía de uno de estos bosones cuando se encuentra en el estado de una partícula etiquetado por  $\nu$ . El número promedio de partículas en el estado de una partícula  $\nu$  es:

$$f(\epsilon_{\nu}) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\nu}-\mu)} - 1} \tag{1.1}$$

donde  $\beta = 1/kT$  y k es la constante de Boltzmann. Mostramos la distribución en la Figura 1.1. Esta distribución se conoce como la distribución de Bose-Einstein y es el punto de partida para estudiar los BEC no interactuantes o clásicos como también se les conoce<sup>1</sup>.

Lo primero que notamos de esta distribución es que el potencial químico,  $\mu$ , no puede ser mayor que la energía mínima de una partícula,  $\epsilon_{min}$ , porque de lo contrario el número promedio de partículas en el estado de mínima energía

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Esta distribución puede obtenerse al calcular el número promedio de partículas en estados de una partícula usando la Gran Función de Partición[26], sin embargo, para propósitos de esta introducción, la tomaremos como el punto de partida.



Figura 1.1: Distribución de Bose-Einstein. En el eje de las abscisas tenemos E/kT y en el de las ordenadas f(E). La línea punteada corresponde al potencial químico.

de una partícula es negativo. Así pues, existe una cota superior al número de partículas que pueden ser acomodadas en estados excitados, a saber[17],

$$N_{max}^{'} = \sum_{\nu} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\nu} - \epsilon_{min})} - 1}$$
(1.2)

donde $\sum'$ es la suma sobre todos los estados excitados.

Así, si el número de partículas excede esta cota,  $N \ge N'_{max}$ , entonces el exceso de partículas debe acomodarse en el estado base. Así pues, esta cota superior puede considerarse el sello de los condensados de Bose-Einstein[17], pues es la condición que fuerza a los gases de bosones a acomodar partículas en el estado base cuando el número de partículas excede un límite determinado por el sistema.

¿Pero cómo se determina esta cota? Sabemos que si el número de partículas excede la cota superior del condensado, ocurre el fenómeno de condensación. Sin embargo, generalmente lo que controlamos no es el número de partículas sino la temperatura. Así, la forma de lograr condensados en condiciones experimentales reales es bajando la temperatura. ¿Pero qué temperatura debemos usar?

Supongamos que tenemos un gas de N partículas. Notamos que, ceteris paribus, a menor temperatura, menor es el número de ocupación de estados de una partícula. Así, si pedimos que N sea igual a la cota superior para una temperatura dada, que llamaremos temperatura crítica  $(T_c)$ , entonces a temperaturas inferiores, el número total de partículas en estados excitados disminuye, por lo que se puebla el estado base, que es el estado que más partículas puede admitir (ver Figura 1.1). Así pues, podemos lograr la condensación de Bose-Einstein por medio de un parámetro bajo control de los experimentales: la temperatura. El modelo clásico nos da una idea de los conceptos básicos detrás del fenómeno de condensación de Bose-Einstein, sin embargo, no puede predecir muchos fenómenos que se observan experimentalmente, entre ellos, la formación de vórtices. Para ello es necesario considerar las interacciones entre los átomos del condensado. Estudiemos esto.

# 1.2. Condensados interactuantes y la ecuación de Gross-Pitaevskii

¿Cómo interactúan los átomos en los condensados de Bose-Einstein y cómo los modelamos? En esta sección, primero estudiaremos la interacción entre átomos neutros usando la teoría de la dispersión; esto nos dará una longitud de dispersión que contiene la información relevante de la interacción y misma que puede medirse experimentalmente[18]. Usando esta longitud de dispersión construiremos un potencial de interacción efectivo que introduciremos al hamiltoniano de muchos cuerpos que describe al condensado. El resultado de minimizar la energía descrita por el hamiltoniano con la restricción de conservación de partículas será la ecuación de Gross-Pitaevskii[20, 21].

#### 1.2.1. Interacción interatómica y la aproximación de contacto

La interacción entre dos partículas está determinada por su longitud de dispersión[18], pero antes de determinar esta longitud debemos determinar primero cuál es el potencial mediante el cual interactúan. En el caso de átomos neutros, este potencial resulta ser de tipo Lenard-Jones, pues a grandes distancias dominan fuerzas de van der Waals y a cortas distancias fuerzas de repulsión debido al acercamiento de las nubes atómicas[18].

Debido a que los átomos en los condensados están a temperaturas muy bajas, es posible hacer dos aproximaciones que simplifican considerablemente la teoría de la interacción. La primera aproximación es que de la expansión de la función de onda en ondas parciales, es posible quedarnos a primer orden, es decir, con la onda parcial s. La segunda aproximación es que la amplitud de la dispersión para esa onda parcial s puede ser calculada usando la aproximación de Born a primer orden. La idea de esta sección es especificar cómo usar la teoría de dispersión para escribir un potencial de interacción interatómico que podamos usar en el hamiltoniano de muchos cuerpos que describe al condensado. Empecemos pues este estudio.

Consideremos el sistema del centro de masa de los dos átomos. Consideraremos además que los átomos son idénticos, no sólo en que son de la misma especie sino en que están descritos por los mismos números cuánticos<sup>2</sup>. En este

 $<sup>^{2}</sup>$ La teoría que exponemos aquí puede ser generalizada al caso de colisiones entre átomos con diferentes números cuánticos; sin embargo, debido a que en este trabajo no consideramos esa posibilidad, no estudiaremos esta extensiónd de la teoría.

sistema y en el caso de colisiones elásticas, la ecuación que debemos resolver para encontrar la función de onda en la colisión es[19]:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(r) = \frac{2m_r}{\hbar^2}U(r)\psi(r)$$
(1.3)

donde  $\psi(r)$  es la función de onda que describe el movimiento relativo de ambas partículas, U(r) es el potencial de interacción entre ambas, k es el número de onda en el sistema del centro de masa (que es igual para la onda incidente y reflejada por el supuesto de elasticidad en la colisión),  $m_r$  la masa reducida y r es la coordenada radial que describe la posición relativa entre ambas. La solución a esta ecuación para r grande es:

$$\psi(r,\theta) = N\left[e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right]$$
(1.4)

donde z es la dirección de propagación de la onda incidente, f es la amplitud de la onda y N es una constante de normalización y  $\theta$  es el ángulo entre el vector de onda incidente y el reflejado.

Así, lo que necesitamos calcular ahora es la amplitud,  $f(\theta)$ , de la onda esférica. En el caso de potenciales con simetría esférica, es conveniente descomponer la función de onda en la base que tiene momento angular y energía definida. En el caso en el que hay simetría azimutal podemos escribir función de onda después de la colisión como:

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l} A_{l} P_{l}(\cos\theta) R_{kl}(r)$$
(1.5)

Para bajas energías, es posible mostrar[18] que domina el término l = 0, conocido como la onda parcial s. Así pues, la función de onda queda como:

$$\psi(r) = 1 - \frac{a}{r} \tag{1.6}$$

donde  $-a = f(\theta)$  es la longitud de dispersión.

Ahora recordemos que si el efecto del potencial de interacción no es muy grande, podemos usar la aproximación de Born a primer orden, de modo que

$$a = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \int d^3r U(r) \tag{1.7}$$

donde hemos usado además que estamos en la aproximación de onda parcial $\boldsymbol{s}.$ 

De ahora en adelante, supondremos que el potencial de interacción puede ser modelado por un potencial efectivo que cumple[18]:

$$\int d^3r U_{eff}(r) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r} \equiv U_0 \tag{1.8}$$

Como las partículas son iguales, su masa reducida es  $m_r = m/2$ , por lo tanto,

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \tag{1.9}$$

Este potencial efectivo además se supone de contacto, es decir,

$$U_{eff} = U_0 \delta(r - r').$$
 (1.10)

Así pues, conociendo la longitud de dispersión, podemos construir un potencial de interacción aproximado que podemos introducir en el hamiltoniano de muchos cuerpos. Notemos que en ningún momento calculamos la longitud de dispersión. Para obtener esta longitud se puede resolver la ecuación de Schroedinger con el potencial tipo van der Waals para separaciones interatómicas grandes y tipo pozo infinito para separaciones menores que una distancia crítica, sin embargo, los resultados de resolver esto no permiten hacer estimaciones realistas de la longitud de dispersión[18], por lo que lo mejor es introducirla como un parámetro que debe ser medido experimentalmente. Usemos pues este potencial para derivar la ecuación de Gross y Pitaevskii.

#### 1.2.2. La ecuación de Gross-Pitaevskii

El hamiltoniano de muchos cuerpos que queremos resolver es[18]:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{\boldsymbol{p_i}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r_i}) \right] + U_0 \sum_{i < j} \delta(\boldsymbol{r_i} - \boldsymbol{r_j})$$
(1.11)

donde V es el potencial externo que atrapa los átomos.

La aproximación de Gross y Pitaevskii consiste en suponer que todos los átomos están en su estado base y que la función de onda total es el producto de estas funciones de onda de una sóla partícula debidamente simetrizado. Así, la función de onda del condensado es:

$$\Psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}, ..., \mathbf{r_N}) = \frac{N!}{n_1! n_2! ... n_N!} \sum_{permutaciones} (\phi_1(\mathbf{r_1}) \phi_2(\mathbf{r_2}) ... \phi_n(\mathbf{r_n})) \quad (1.12)$$

donde  $n_i$  es el número de átomos en el estado i y  $\phi_i$  es la función de onda de una partícula en el estado i.

Ahora, como todas las partículas están en el estado base, la expresión anterior se reduce a:

$$\Psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}, ..., \mathbf{r_N}) = \prod_{i=1}^{N} \phi(\mathbf{r_i})$$
(1.13)

Utilizando esta función de onda, tenemos que la energía promedio del condensado es:

$$E = N \int d^3r \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{N-1}{2} U_0 |\phi(\mathbf{r})|^4 \right]$$
(1.14)

donde N(N-1)/2 corresponde al número de pares que pueden formarse.

Es conveniente introducir la definición de densidad en el condensado. Así, introduciendo la definición  $\psi(\mathbf{r}) = N^{1/2}\phi(\mathbf{r})$  y minimizando la energía manteniendo el número de partículas constante ( $\delta E - \mu \delta N = 0$ ) obtenemos:



Figura 1.2: Experimento típico para atrapar y enfriar átomos alcalinos[18]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) + U_0|\psi(\boldsymbol{r})|^2\psi(\boldsymbol{r}) = \mu\psi(\boldsymbol{r})$$
(1.15)

donde  $\mu$  es el potencial químico, mismo que resulta ser igual a la energía del condensado por la restricción ( $\delta E - \mu \delta N = 0$ ). Por esta razón, de ahora en adelante usaré indistintamente energía del condensado o potencial químico. Ésta es la ecuación de Gross-Pitaevskii[20, 21] y es la ecuación básica de modelación de condensados de Bose-Einstein con interacción con la que trabajaremos a lo largo de este trabajo.

Con esta introducción, podemos entender qué dice la ecuación de Gross y Pitaevskii: la energía del condensado es igual a su energía cinética más la asociada al potencial confinante más la energía asociada a la interacción entre átomos.

Ahora, para concluir esta sección sólo nos falta especificar el tipo de potenciales que usamos para confinar. Aunque en principio el potencial externo puede ser el que sea, usualmente es armónico, de modo que la ecuación queda como:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\psi + g\left|\psi\right|^2\psi = \mu\psi$$
(1.16)

donde además hemos cambiado  $U_0$  por g pues es la notación estándar en muchas otras fuentes.

### 1.3. Aspectos experimentales sobre confinamiento y enfriamiento de átomos

Antes de terminar la introducción, consideramos necesario introducir los aspectos básicos de las técnicas experimentales que hacen posible la realización de condensados de Bose-Einstein en el laboratorio. El esquema de un tipo de experimento de atrapamiento y enfriamiento de átomos se muestra en la Figura 1.2, copiada de la referencia[18].

El esquema básico de este experimento es el siguiente. Los átomos salen de un horno caliente y entran al desacelerador de Zeeman donde se reduce su velocidad, después de lo cual son atrapados en una trampa magneto óptica (MOT por sus siglas en inglés). En la MOT se generan nubes con temperaturas del orden de cientos de nK en las que la densidad es limitada por procesos de emisión y reabsorción de fotones. A continuación se transfiere la nube a un potencial conservativo, ya sea magnético u óptico, que generalmente puede aproximarse mediante un potencial armónico como el que consideramos en la ecuación 1.16. Finalmente se utiliza la técnica de enfriamiento por evaporación en la que se reduce la temperatura y se aumenta la densidad de la nube de manera gradual hasta que se alcanza la degeneración, produciéndoce así el fenómeno de condensación de Bose-Einstein. El propósito de esta sección es explicar los aspectos básicos de las fuerzas que se usan para lograr experimentalmente la condensación.

#### 1.3.1. La trampa magneto óptica y el desacelerador Zeeman

Para poder entender cómo funcionan estos aparatos, es necesario que estudiemos cuáles son las fuerzas que actúan sobre los átomos en presencia de un campo eléctrico. Estudiemos pues estas fuerzas.

En presencia de un campo eléctrico los átomos se polarizan. Usando teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, es posible mostrar[18] que la polarizabilidad  $\alpha$  de un átomo en presencia de un campo eléctrico  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$  es:

$$\alpha(\omega) = \sum_{n} \frac{2(E_n - E_0) \left| \langle n | \boldsymbol{d} \cdot \hat{\epsilon} | 0 \rangle \right|^2}{(E_n - E_0)^2 - (\hbar \omega)^2}$$
(1.17)

donde  $E_n$  es la energía del átomo en el estado n,  $\hat{\epsilon}$  es la dirección del campo eléctrico y donde

$$\boldsymbol{d} = -e\sum_{j} \boldsymbol{r}_{j} \tag{1.18}$$

es el momento dipolar eléctrico, con  $\boldsymbol{r}_j$  la posición relativa al núcleo del electrón j.

Como la mayoría de las situaciones de interés son aquéllas en las que la frecuencia del campo eléctrico está cerca de la resonancia con la de algún estado excitado e, obtenemos que la polarizabilidad atómica es:

$$\alpha(\omega) \approx \frac{|\langle e|\boldsymbol{d} \cdot \hat{\epsilon}|0\rangle|^2}{E_e - E_0 - \hbar\omega}$$
(1.19)

Hasta ahora hemos supuesto que si el átomo es excitado, se quedará ahí por siempre; ése no es el caso. Entonces introducimos fenomenológicamente la razón de decaimiento espontáneo del estado excitado,  $\Gamma_e$ . Si la variación temporal del estado excitado es la usual,  $e^{-iE_et/\hbar}$ , entonces la polarizabilidad ahora es:

$$\alpha(\omega) = \frac{\left|\langle e|d_i|0\rangle\right|^2}{E_e - E_0 - \hbar\omega - i\hbar\Gamma_e/2}$$
(1.20)

Así pues, la polarizabilidad tiene ahora una parte real

$$\Re[\alpha(\omega)] = \frac{\left(E_e - E_0 - \hbar\omega\right) \left|\left\langle e|\boldsymbol{d} \cdot \hat{\epsilon}|0\right\rangle\right|^2}{\left(E_e - E_0 - \hbar\omega\right)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2}$$
(1.21)

y otra imaginaria

$$\Im[\alpha(\omega)] = \frac{\hbar\Gamma_e/2 \left| \langle n | \boldsymbol{d} \cdot \hat{\epsilon} | 0 \rangle \right|^2}{(E_e - E_0 - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_e/2)^2}$$
(1.22)

Al igual que en el caso clásico, la parte real es la parte que modela la polarizabilidad usual, mientras que la imaginaria representa la absorción de energía por parte del átomo.

Definimos entonces la tasa de absorción de energía por el átomo o, puesto de otra forma, la tasa con la que se pierden átomos del estado base en favor del estado excitado e, como:

$$\Gamma_0 = \frac{1}{\hbar} \Im[\alpha(\omega)] \langle \mathcal{E}(\boldsymbol{r}, t)^2 \rangle_t$$
(1.23)

donde  $\langle \cdot \rangle_t$  denota promedio sobre un ciclo temporal del campo.

Así, el átomo en presencia de un campo eléctrico siente dos fuerzas, la primera debida a la fuerza de polarización usual; la segunda, a la transferencia de momento de los fotones absorbidos. La fuerza dipolar está dada por[18]:

$$\boldsymbol{F_{dip}} = \frac{1}{2} \Re[\alpha(\omega)] \nabla \langle \mathcal{E}(\boldsymbol{r}, t)^2 \rangle_t$$
(1.24)

Mientras que la de radiación está dada por[18]:

$$\boldsymbol{F_{rad}} = \hbar \boldsymbol{q} \Gamma_0 \tag{1.25}$$

donde  $\hbar \boldsymbol{q}$  es el momento del fotón.

El punto clave que debemos notar es que ambas fuerzas dependen de la cantidad  $E_n - E_0 - \hbar \omega = \hbar(\omega_{n0} - \omega)$ . La diferencia de frecuencias  $\omega - \omega_{n0}$  es tan importante que tiene su propio nombre, a saber, desintonización o «detuning» como se le conoce en inglés.

Notamos entonces que el experimental tiene control sobre las fuerzas que actúan sobre el átomo. Por ejemplo, de la expresión para la polarizabilidad real, notamos que para un detuning al azul, la fuerza dipolar es hacia las regiones de menor campo eléctrico, mientras que para un detuning hacia el rojo la situación se invierte. Estas fuerzas también pueden controlarse por medio de campos magnéticos gracias al efecto Zeeman. Al mover los niveles de energía por medio de un campo magnético, también se afecta el detuning y, por lo tanto, la fuerza. Usemos esto para entender un poco más cómo es que se pueden atrapar y enfriar átomos.

#### El desacelerador Zeeman

Como dijimos, el desacelerador Zeeman sirve para enfriar átomos. ¿Cómo lo hace? El principio básico es que al mandar un láser en dirección contraria a la del haz de átomos, la absorción de fotones con momento en dirección opuesta hará que los átomos disminuyan su velocidad. ¿Dónde quedó entonces la parte Zeeman? Resulta que en estas trampas, la frecuencia del láser que detecta el átomo se ve afectada por el efecto Dopler de forma distinta en diferentes partes de la trampa. Así, para que este aparato funcione, es necesario modificar los niveles energéticos de forma distinta en diferentes partes del desacelerador. Para esto se usan campos magnéticos que modifican los niveles usando efecto Zeeman, dándole así el nombre al aparato.

#### La MOT

Con la discusión anterior también podemos entender el funcionamiento básico de la trampa magneto óptica. El punto central del funcionamiento de la MOT es que, debido a que los niveles energéticos del átomo dependen del campo magnético en el que se encuentran, si introducimos un campo magnético no uniforme, los átomos en diferentes partes de la trampa tendrán diferentes niveles energéticos y por lo tanto sentirán fuerzas distintas, logrando así atraparlos.

#### 1.3.2. Enfriamiento por evaporación

Las estadísticas de Bose-Einstein muestran características que las diferencian de las de Maxwell-Boltzamann cuando se cumple la condición[22]:

$$\frac{N}{V} \ge \frac{(2mkT)^{3/2}}{h^3} \tag{1.26}$$

donde N es el número de partículas, V el volumen, m la masa de las partículas y k la constante de Boltzmann. Así pues, para lograr experimentalmente un condensado de Bose-Einstein, es necesario lograr que se cumpla esta relación entre densidad y temperatura.

A pesar de que el enfriamiento por láser reduce drásticamente la temperatura, esta reducción no es suficiente para lograr la condensación de Bose-Einstein en las densidades que se logran con las técnicas de atrapamiento que acabamos de discutir[18]. Por eso es necesario enfriar aún más los átomos. Para ello se usa el procedimiento de enfriamiento por evaporación. En esta etapa también se comprime aún más el condensado pero la compresión sigue limitada por los procesos de absorción y emisión de fotones, de ahí la gran importancia del enfriamiento.

El principio detrás de este mecanismo de evaporación es el mismo que nos permite enfriar una olla caliente cuando la destapamos. Al destapar la olla, las moléculas con más energía cinética escapan de la olla, reduciendo así la temperatura del guiso. El concepto es el mismo, excepto que en vez de guiso tenemos átomos neutros y en vez de olla y tapa sólo tenemos un potencial que



Figura 1.3: Enfriamiento por evaporación

atrapa los átomos. Así pues, para «destapar la olla», debemos bajar la altura del potencial como se muestra en la figura $\ 1.3.$ 

## Capítulo 2

## Vórtices en condensados rotantes

Para poder desarrollar nuestro proyecto de investigación, primero reprodujimos resultados anteriores. El primero de estos fue la solución de la ecuación de Gross-Pitaevskii[20, 21] para condensados con trampas armónicas estáticas. Éste es el problema más sencillo que se puede resolver y nos sirvió de introducción al tema.

Una vez completado el trabajo con los condensados en trampas armónicas estáticas, trabajamos con condensados en trampas armónicas rotantes. Como resultado de la rotación, el condensado nuclea vórtices en redes triangulares iguales a las de los superconductores tipo II en presencia de campos magnéticos uniformes. Es por esto que este problema es el antecedente directo de nuestra investigación.

Otra razón por la que trabajamos primero con este sistema es que es el sistema más sencillo en el que se pueden obtener vórtices en gases atómicos ultrafríos, de hecho, es el primero en el que se logró observarlos experimentalmente[6]. Así pues, este sistema nos permitió introducirnos al tema de vórtices en condensados de Bose-Einstein utilizando códigos que se encuentran en la literatura.

Consideramos importante mencionar que aunque nuestros códigos están basados en artículos publicados sobre el tema[23, 24, 25], nos dimos a la tarea de programarlos nosotros. Nunca usamos ningún paquete computacional ni códigos publicados en internet, no por otra cosa que para estar seguros de nuestros resultados y, además, a manera de entrenamiento.

### 2.1. Condensados de Bose-Einstein en trampas armónicas estáticas

Generalmente, el método más rápido para resolver la ecuación de Gross-Pitaevski es el método del «Split Operator»[23]. El operador de evolución temporal de la ecuación de Shroedinger cuando el hamiltoniano H no depende explícitamente del tiempo es  $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ , donde t es la variable temporal, por lo que

$$\psi(\bar{r}, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t/\hbar}\psi(\bar{r}, t) \tag{2.1}$$

La idea fundamental del método de split operator es notar que si  $\hat{H} = T + V$ , donde T es el operador de energía cinética y V el de la energía potencial, entonces para pequeños pasos de tiempo  $\Delta t$  el operador de evolución temporal puede escribirse como[23]:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} = e^{-iT\Delta t/2\hbar} e^{-iV\Delta t/\hbar} e^{-iT\Delta t/2\hbar} + O(\Delta t^3)$$
(2.2)

Si la meta del problema es evolucionar una función dada, entonces esto se logra utilizando las propiedades de la parte cinética del hamiltoniano bajo transformación de Fourier, pues entonces:

$$e^{-iT\Delta t/2\hbar}\psi(\bar{r},t) = \mathcal{F}^{-1}(e^{-iK\Delta t/2\hbar}\mathcal{F}(\psi(\bar{r},t)))$$
(2.3)

donde  $\mathcal{F}$  denota transformada de Fourier, y K es la malla de momentos en el espacio de momentos.

A veces, evolucionar la función es la meta; sin embargo, si la meta es obtener el estado base del problema, debemos modificar el método. Se puede probar[24] que la minimización del funcional de energía de Gross-Pitaevskii es equivalente a resolver la ecuación de Gross-Pitaevski con la sustitución  $t \rightarrow -it$ . A este método se le conoce como «flujo de gradiente normalizado». Así, el operador de evolución temporal a aplicar es:

$$e^{-\hat{H}\Delta t/\hbar} = e^{-T\Delta t/2\hbar} e^{-V\Delta t/\hbar} e^{-T\Delta t/2\hbar} + O(\Delta t^3)$$
(2.4)

Aplicando este método resolvimos el problema en dos dimensiones. La Figura 2.1 es la densidad para  $\tilde{\beta} = g/E_c = 1000$ ,  $E_c = \hbar \omega$  y donde la unidad de longitud es  $a = (\hbar/m\omega)^{1/2}$  Cabe mencionar que el error en norma dos de la función es del orden de  $10^{-5}$  y corre en 5 segundos en una laptop casera.

### 2.2. Condensados de Bose-Einstein en trampas armónicas rotantes

En la sección anterior estudiamos la solución del problema básico. El método de split operator funciona cuando es posible hallar expresiones para  $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  que se separen en energía potencial y cinética. Sin embargo, esto no siempre es posible; el problema de un condensado rotando es uno de ellos. Para este sistema, la ecuación de Gross-Pitaevski en el marco de referencia que rota con el condensado a velocidad angular  $\Omega$  es[18]:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi + g\left|\psi\right|^2\psi - \hbar\Omega L_z\psi$$
(2.5)



Figura 2.1: Densidad con trampa armonica

donde  $\Omega$  es la velocidad angular a la que rota el condensado y  $L_z$  es el momento angular en la dirección z.

Para resolver este problema, utilizamos el método de «Discretización semiimplícita espectral de Euler», que se encuentra en la literatura[24, 25]. El método consiste en utilizar diferencias finitas para la parte temporal y transformada de Fourier para la parte espacial. De nuevo usamos el «flujo de gradiente normalizado» para encontrar la solución al estado base, es decir hacemos  $t \rightarrow -it$  en la ecuación de Gross-Pitaevski. Discutamos el método.

Adimensionalizando como en la sección anterior y haciendo el cambio  $t \rightarrow -it$  para encontrar el estado base, la ecuación de GP queda como:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \nabla^2 \psi - V \psi - \beta \left|\psi\right|^2 \psi + \tilde{\Omega} L_z \psi$$
(2.6)

Para implementar el algoritmo en la computadora es necesario acotar y discretizar el dominio tanto en el espacio de coordenadas como en el de momentos. Para acotar los dominios, nos damos cuenta de que la función debe decaer exponencialmente. Así, escogemos un dominio  $D = [a, b] \times [c, d]$ . Definimos una malla para  $x \operatorname{como} x_j = a + j\Delta x$ ,  $y_j = c + j\Delta y$ , con  $\Delta x = (b-a)/M$  y  $\Delta y = (d-c)/N$ , con M y N números pares.

El método inicia con un ansatz, que en nuestro caso es una gaussiana. Esta solución es una matriz  $\phi_{j,k}^0$ , donde cada entrada corresponde al valor de la función en el punto  $(x_j, y_k)$ . Denotamos como  $\phi_{j,k}^n$  a la función al tiempo n.

Así, la ecuación matricial que queremos resolver para obtener la solución al

tiempon+1es:

$$\frac{\phi_{j,k}^{n+1} - \phi_{j,k}^{n}}{\Delta t} = \left(\frac{1}{2}\nabla^2 - \alpha\right)\phi_{j,k}^{n} + G_{j,k}^{n}\phi_{j,k}^{n}$$
(2.7)

donde

$$G_{j,k}^{n} = \left(\alpha - V_{j,k} - \beta |\phi_{j,k}^{n}|^{2} + \tilde{\Omega}L_{z}\right)$$
(2.8)

y  $\alpha$  es un parámetro de estabilización definido como  $\alpha = (1/2)(b_{max} + b_{min})$  con

$$b_{max} = \max_{j,k} \left( V_{j,k} + \beta \phi_{j,k}^n \right) \quad \text{y} \quad b_{min} = \min_{j,k} \left( V_{j,k} + \beta \phi_{j,k}^n \right) \tag{2.9}$$

Para resolver esto eficientemente, nos damos cuenta de que en el espacio de momentos, el operador  $\frac{\partial}{\partial x}$  se cambia por  $-i\mu_p$  y  $\frac{\partial}{\partial y}$  se cambia por  $-i\lambda_q$ , con  $\mu_p = \frac{2p\pi}{b-a}$  y  $\lambda_q = \frac{2q\pi}{d-c}$  donde además p = -M/2, ..., M/2 - 1 y q = -N/2, ..., N/2 - 1. Así, haciendo transformación de Fourier en la ecuación a resolver y despejando,

$$\mathcal{F}\left(\phi_{j,k}^{n+1}\right) = \frac{2}{2 + \Delta t (2\alpha + \mu_p^2 + \lambda_q^2)} \left[\mathcal{F}\left(\phi_{j,k}^n\right) + \Delta t \mathcal{F}\left(G_{p,q}^n\right)\right]$$
(2.10)

donde  $\mathcal{F}$  denota transformada de Fourier.

Así pues, al invertir la transformada de Fourier, se obtiene la solución para el paso temporal n + 1. El procedimiento se repite hasta que se satisfaga algún criterio de convergencia, por ejemplo, que la diferencia en norma dos de la función al tiempo n y al tiempo n + 1 sea menor que  $10^{-10}$ .

En nuestro programa, el potencial  $V = (1/2)\omega^2 r^2$ . La Figura 2.2 es la densidad para  $\tilde{\beta} = 8000$  y  $\tilde{\Omega} = \Omega/\omega = 6$ . La adimensionalización es la misma que en la sección anterior.

La solución de esta ecuación tiene un perfil idéntico al del caso sin término de rotación pero ahora presenta vórtices, que consisten en ceros del perfil de densidad. Los vórtices se acomodan en redes triangulares al igual que en los superconductores tipo II. Éste es el sello de los condensados de Bose-Einstein en trampas rotantes.

Una ventaja de estos resultados es que nos permitieron conectar nuestro trabajo con los resultados experimentales. Como se puede notar al comparar nuestra solución (Figura 2.2) con los resultados experimentales (Figura 2.3), nuestra solución modela correctamente el efecto observado en el laboratorio. Los resultados experimentales que citamos son los observados por el grupo de Ketterle et al.[6].

Como mencionamos antes, una de las características de la obtención de vórtices por medio de este método es que no hay forma de controlar la aparición de los vórtices. Es decir, sólo es posible obtenerlos en la forma de la red triangular que se muestra en la Figura 2.3. Entonces nos preguntamos ¿será posible colocar vórtices usando algún otro método de tal suerte que no siempre se acomoden en redes triangulares? Como veremos, la respuesta es que sí y no sólo



Figura 2.2: Densidad para condensado rotante.



Figura 2.3: Vórtices en condensados rotantes[6].

podemos hacerlo de forma que no se acomoden en redes triangulares, sino que podemos colocarlos donde querramos. Podemos colocar cuantos vórtices deseemos y dónde lo deseemos. Sin embargo, esta libertad trae consigo un precio a pagar. Este precio es que debemos trabajar con condensados con grados internos de libertad.

Hasta ahora hemos trabajado con los condensados sin tomar en cuenta sus grados internos de libertad; sin embargo, nuestro método necesita que los átomos tengan estos grados internos. Estudiemos pues cómo sacarle provecho a estas propiedades para nuclear vórtices como prometimos.

## Capítulo 3

## Ingeniería de vórtices

Como mencionamos, es posible colocar vórtices en condensados de Bose-Einstein a voluntad. La idea básica es que los vórtices se nuclearán en los lugares donde el campo magnético no uniforme se hace cero; por ello, sólo necesitamos producir campos magnéticos con ceros donde queremos que los vórtices se nucleen. Así pues, adquirimos control sobre los vórtices en el condensado mediante campos magnéticos que, en principio, están totalmente bajo control.

Como veremos, además de colocar los vórtices en la posición que deseemos, también es posible decidir la circulación del vórtice. Para ello, de nuevo recurrimos a los campos magnéticos que ya controlamos. Al seleccionar un campo con orden mulitpolar adecuado podemos lograr que el vórtice tenga la circulación deseada; los campos de orden multipolar uno generan vórtices de circulación uno, los de orden dos, generan circulación dos y así sucesivamente. Así pues, podemos controlar las características que definen al vórtice: posición y circulación. Es por esto que hablamos de ingeniería de vórtices.

A manera de desarrollar nuestra propuesta, empezamos por exponer las propiedades magnéticas de los átomos con los que se pueden hacer condensados atómicos. A continuación estudiamos una simplifación de nuestro modelo en la que no se toman en cuenta las interacciones entre átomos descritas por el parámetro g que discutimos en la introducción. Finalmente desarrollamos nuestro modelo y explicamos cómo es que logramos colocar vórtices a voluntad.

### 3.1. Propiedades magnéticas de átomos alcalinos e hidrógeno

Los átomos que nos interesan son los metales alcalinos y el hidrógeno neutros. La razón por la que nos interesan es que con estos elementos es posible generar condensados de Bose-Einstein en el laboratorio. Para lograrlo, es necesario confinar los átomos mediante potenciales magneto-ópticos hasta lograr densidades del orden de  $10^{13} - 10^{15}$  cm<sup>-3</sup> y enfriarlos a temperaturas inferiores a los  $10^{-9}$ K.

Ahora, estos átomos deben ser bosones porque presentan el fenómeno de

condensación de Bose-Einstein. ¿Pero por qué son bosones estos átomos? La estructura electrónica de los átomos alcalinos e hidrógeno se caracteriza por presentar capas electrónicas llenas más una capa con sólo un electrón en el nivel de momento angular s de tal forma que el número cuántico de spin electrónico es impar. Así pues, para que estos átomos sean bosones, es necesario que tengan spin nuclear impar. Esto ocurre con los isótopos con números de masa (A) impares. Entonces debemos corregir la frase con la que abrimos la sección, nos interesan los isótopos de los elementos alcalinos e hidrógeno que tienen números de masa impares.

Para ilustrar esto, consideremos dos ejemplos. El hidrógeno tiene estructura electrónica 1s y tiene A = 1 y por lo tanto es un bosón; el <sup>23</sup>Na tiene la estructura electrónica  $1s^22s^22p^63s^1$  y tiene A = 23 por lo que también es un bosón.

Esta estructura atómica tiene consecuencias importantes en presencia de campos externos. En particular, cuando estos átomos interactúan con un campo magnético externo, los espines nuclear y electrónico de las últimas capas interactúan con el campo. Si I y J = L + S son los operadores de spin nuclear y momento angular más spin electrónico respectivamente, entonces el hamiltoniano de cada átomo en presencia de un campo magnético constante en la dirección z es el siguiente:

$$H_{spin} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + CJ_z + DI_z \tag{3.1}$$

donde  $C = g\mu_B B$ ,  $D = -\mu B/I$ , A es una constante de acoplamiento entre spines,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr, g el factor de Landé y  $\mu$  es la constante de acoplamiento del spin nuclear con el campo magnético. Sin embargo, para los átomos que nos interesa, D es por lo menos  $10^{-3}$  veces menor que A y C[18], por esto tomamos D = 0. Además, para todos estos átomos L = 0, por lo que J = S.

De este sistema nos interesan los eigenestados pues se usan de base para otros hamiltonianos de spin. Es decir, los eigenkets de este hamiltoniano son los kets que usaremos de base para todos los sistemas más adelante.

Consideremos como ejemplo al hidrógeno. Para este elemento I = J = 1/2. Definiendo los parámetros b = C/A y  $\theta$  con tan  $2\theta = 1/b$ , los eigenestados del hamiltoniano son[18]:

$$|a\rangle = \cos\theta |1/2, -1/2\rangle - \sin\theta |-1/2, 1/2\rangle$$
(3.2)

$$|b\rangle = |-1/2, -1/2\rangle$$
 (3.3)

$$|c\rangle = \sin\theta |1/2, -1/2\rangle + \cos\theta |-1/2, 1/2\rangle$$
(3.4)

$$|d\rangle = |1/2, 1/2\rangle \tag{3.5}$$

con eigenenergías

$$E_a = -A(\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{1+b^2}) \tag{3.6}$$

$$E_b = A(\frac{1}{4} - \frac{b}{2}) \tag{3.7}$$

$$E_c = -A(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{1+b^2}) \tag{3.8}$$

$$E_d = A(\frac{1}{4} + \frac{b}{2}) \tag{3.9}$$

Las energías como proporción del parámetro de interacción spin nuclear-electrónico, A, y como función del campo magnético se muestran en la figura 3.1.



Figura 3.1: Energías como proporción del parámetro A del multiplete del hidrógeno como función del campo magnético B en la dirección z.

De la Figura 3.1 notamos que para campos magnéticos pequeños, si el estado se prepara incialmente en el triplete, debemos considerar el triplete completo y podemos olvidarnos del estado  $|a\rangle$  pues la probabilidad de transición entre el triplete y  $|a\rangle$  será pequeña. Por otro lado, si el campo magnético es grande, podemos considerar al sistema como dos estados de dos niveles. Este es un punto fundamental en lo que sigue pues a veces trataremos un sistema con tres grados de libertad y a veces con dos. Así, éste es el argumento básico que nos permite hacer esta aproximación.

Para los átomos alcalinos mencionados, el procedimiento es el mismo sólo que con número de spin magnético I = 3/2. En estos sistemas también es posible separar en estados de triplete y ahora también quintuplete[18].

Ahora sí están todos los elementos para describir nuestra propuesta. Consideremos a alguno de los gases descritos al principio de la sección bajo la presencia de un campo magnético de la forma:

$$\boldsymbol{B} = (B_x(x,y), B_y(x,y), B_0) \tag{3.10}$$

es decir, un campo en las direcciones x y y con dependencia espacial y constante en la dirección z.

Así pues, el hamiltoniano de nuestra propuesta es:

$$H_{spin} = A\boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{J} + C_0 J_z + C(J_x + J_y)$$
(3.11)

donde  $C = g\mu_B B$  y  $C_0 = g\mu_B B_0$ . Notamos que este hamiltoniano es distinto al anterior. Para trabajar con este hamiltoniano usaremos la base generada por el hamiltoniano anterior.

Como ejemplo, consideremos de nuevo al átomo de hidrógeno. Nos interesa escribir este hamiltoniano para el átomo de hidrógeno en la base que acabamos de desarrollar (también para el átomo de hidrógeno). Haciendo el álgebra, el hamiltoniano en función del parámetro b = C/A se escribe como:

$$\begin{pmatrix} A(\frac{1}{4} + \frac{b}{2}) & \sin\theta(1-i) & 0 & \cos\theta(1-i) \\ \sin\theta(1+i) & -A(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{1+b^2}) & \cos\theta(1-i) & 0 \\ 0 & \cos\theta(1+i) & A(\frac{1}{4} - \frac{b}{2}) & -\sin\theta(1+i) \\ \cos\theta(1+i) & 0 & \sin\theta(-1+i) & -A(\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\sqrt{1+b^2}) \end{pmatrix}$$

Así, vemos que si podemos garantizar que el estado  $|a\rangle$  está despoblado siempre, podemos reducir el problema a:

$$\begin{pmatrix} A(\frac{1}{4} + \frac{b}{2}) & \sin\theta(1-i) & 0\\ \sin\theta(1+i) & -A(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sqrt{1+b^2}) & \cos\theta(1-i)\\ 0 & \cos\theta(1+i) & A(\frac{1}{4} - \frac{b}{2}) \end{pmatrix}$$

Notamos que este es casi el hamiltoniano de un sistema de spin uno con dos excepciones:

- 1. la diagonal no corresponde a  $\mu \sigma_z$  sino a las eigenenergías de los estados en presencia del campo magnético uniforme en z.
- 2. los términos que corresponden a  $J_x$  y  $J_y$  aparecen con términos senos y cosenos. Así, para obtener los operadores  $J_x$  y  $J_y$  de spin 1, debemos pedir  $\theta = \cos^{-1}(1/\sqrt{2}) = \sin^{-1}(1/\sqrt{2})$

Si además podemos garantizar que la población en  $|b\rangle$  es siempre cero, entonces obtenemos

$$\left(\begin{array}{cc}A(\frac{1}{4}+\frac{b}{2})&\sin\theta(1-i)\\\sin\theta(1+i)&-A(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}\sqrt{1+b^2})\end{array}\right)$$

que es un hamiltoniano de la forma  $\mu \cdot \mathbf{B}$  para el caso de spin 1/2 con las salvedades antes descritas.

Con la parte de spin del hamiltoniano desarrollada, es posible construir el hamiltoniano que nos interesa completo para cualquier átomo:

$$H\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi + g \left|\Psi\right|^2 \Psi + C\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{J}\Psi$$
(3.12)

donde en el caso de dos dimensiones

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_+\\ \psi_- \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

y J son las matrices de Pauli. Para el caso de spin uno  $\Psi$  tiene tres componentes y J ahora son las matrices correspondientes.

Como mostraremos más adelante, este sistema nos permite decidir la posición exacta y la circulación de los vórtices en cada una de las componentes (de ahora en adelante, le llamaré fases a las componentes del espinor y carga a la circulación de los vórtices). Esta capacidad de controlar la posición y carga de los vórtices es el centro de nuestra propuesta.

Nuestro trabajo ahora es especificar cómo es que podemos controlar estas propiedades, pero antes de entrar de lleno a la solución del sistema, consideremos una simplificación del modelo que no toma en cuenta la interacción entre átomos.

### 3.2. Modelo sin interacción interatómica

Cuando los átomos en el gas no interactúan, el término de densidad en la ecuación de Gross-Pitaevski desaparece. El sistema es entonces equivalente al de un sólo átomo en la trampa. Este problema fue resuelto por Longuett-Higgins[27] para explicar el espectro energético de ciertas moléculas. En su problema, Longuett-Higgins, utilizando la aproximación de Born-Oppenheimer, describe los estados energéticos de los electrones en la molécula como un gas que interactúa con los núcleos. Estos núcleos se mueven en las direcciones normales de oscilación, ejerciendo sobre los electrones un potencial adiabático (puesto que la frecuencia de oscilación de los núcleos es mucho menor que la energía de los electrones entre  $\hbar$ ), de modo que los estados electrónicos quedan etiquetados por la frecuencia normal de oscilación de los núcleos.

De acuerdo con la sección anterior, separando la parte radial de la angular, es posible mostrar que el sistema que queremos resolver para spin 1/2 es:

$$\frac{-\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \psi_+\right) - \frac{m^2}{r^2} \psi_+\right] + \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 \psi_+ + \kappa r \psi_- = E \psi_+ \tag{3.14}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\psi_-}{\partial r}\right) - \frac{(m+1)^2}{r^2}\psi_-\right] + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2\psi_- + \kappa r\psi_+ = E\psi_- \qquad (3.15)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia de la trampa armónica,  $\kappa$  es la intensidad del campo multiplicada por el magnetón de Bohr,  $\psi_+$  y  $\psi_-$  son las componentes del espinor y de momento se desprecia la interacción del spin nuclear y electrónico.

Resolvimos este problema usando el método de elemento finito. Este método típicamente sube la precisión a varios órdenes de magnitud con respecto al método de diferencias finitas.

Los códigos están hechos en Matlab y contienen una subrutina que optimiza la localización de los nodos. El intervalo en el que se trabaja es de cero



Figura 3.2: Eigenfunciones para m = 0, n = 1 y  $k^2 = 5$ .

a quince unidades de distancia  $a = \sqrt{\hbar/M\omega}$  donde M y  $\omega$  son la masa del átomo y la frecuencia de la trampa respectivamente. El número de nodos es de 441 distribuidos de forma que se optimice el uso de memoria. El error usando el esquema de mallas adaptativas en el eigenvalor es del orden de e-6 para el primer eigenvalor. Se pierden cifras significativas hasta llegar a 3 para el eigenvalor 24 y hasta dos en el eigenvalor 41. Estas estimaciones están hechas para el oscilador armónico radial bidimensional para el cual la solución analítica es conocida. Los resultados (eigenfunciones y eigenenergías) coinciden con los reportados por Longuett-Higgins[27].

Las eigenfunciones están etiquetadas por dos números cuánticos: el de momento angular, m, y el de energía, n. Debido a que estamos estudiando condensación de Bose-Einstein, nos interesan las soluciones de mínima energía para diferentes números de momento angular. Así, presento las gráficas de las funciones asociadas al estado base del problema para  $k^2 = 5$  y para valores m = 0, m = 1 y m = 2 del número cuántico m. Las gráficas son de  $\psi_+$  (psi en la gráfica, linea continua) y  $\psi_-$  (fi en la gráfica, linea punteada) contra r en unidades de  $a = \sqrt{\hbar/M\omega}$ . Las gráficas se muestras en las Figuras 3.2 , 3.3 y 3.4.

Notemos que para m = 0 el estado base tiene soluciones tales que son cero en cero para una fase y distinta de cero para la otra. Ahora, el que las funciones sean cero en cero, como veremos, indica una solución tipo vórtice. Es decir, para m = 0 las soluciones del problema lineal presentan vórtice en una fase y en la otra no. Sin embargo, para números cuánticos superiores ya no sucede que una de las fases sea cero en cero y la otra no. Es decir, para números cuánticos superiores, en el problema lineal ya no aparecen soluciones donde una fase tiene vórtice y la otra no. Este comportamiento se repite en todos los números cuánticos  $m \ge 1$ . Esto será una parte importante de la propuesta. ¡Recuérdenlo! Ahora sí, consideremos el problema completo.



Figura 3.3: Eigenfunciones para  $m=1,\,n=1$  y  $k^2=5.$ 



Figura 3.4: Eigenfunciones para  $m = 2, n = 1, k^2 = 5.$ 

#### 3.3. Modelo con interacción interatómica

Ahora consideramos el modelo en el que los átomos interaccionan entre ellos por medio del potencial de contacto que mencionamos en la introducción. Esta interacción es responsable de la riqueza de soluciones de la ecuación de Gross-Pitaevskii, en particular de la aparición de vórtices. Para ilustrar nuestros resultados, a diferencia del modelo sin interacción, también trabajamos con condensados con tres grados de libertad.

Para resolver el problema con interacción adaptamos el código que usamos en la solución del condensado rotante[24]. Corrimos el programa con diferentes campos magnéticos utilizando el mismo criterio de convergencia que en el condensado rotante. En todos los casos que corrimos, los campos fueron escogidos de forma que:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \tag{3.16}$$

Además de esta restricción, debido a que los condensados están dentro de una cámara de vacío, probamos con campos que cumplen

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = 0 \tag{3.17}$$

para asegurar que no hay fuentes de campo en la región. En algunos casos, para contemplar la posibilidad de campos con fuentes, planteamos posibles experimentos con

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{J}_{free} \tag{3.18}$$

sin embargo, debido a las dificultades expermentales de estos campos, nos concentramos en los que no tienen fuentes, aunque mostraremos un ejemplo de condensado bajo la presencia de campos con fuentes.

Después de correr el programa para muchos campos magnéticos distintos y condiciones iniciales también diferentes, obtuvimos los siguientes resultados:

(1) Los vórtices aparecen en todos los puntos donde el campo se hace cero pero no en todas las fases.

(2) Si aparecen vórtices en algunas de las fases, entonces en el mismo lugar en otra de las fases debe haber una acumulación de densidad o «pico», de tal forma que el cuadrado de la densidad,  $|\Psi|^2 = \sum_i |\psi_i|^2$  es la de un condensado sin campo magnético.

(3) La función de onda cerca del vórtice es de la forma  $\psi = f(r)e^{\pm il\phi}$ , por lo que la circulación es

$$\mathcal{C} = \pm l \oint \nabla \phi \cdot \mathbf{dl} = \pm 2l\pi \tag{3.19}$$

con l = 1, 2, 3, 4 dependiendo de si el campo es dipolar, cuadrupolar, octupolar, hexadecupolar, etc. Esta circulación, en general, será positiva si el vórtice aparece en la fase más y negativa si aparece en la fase menos; sin embargo, hay excepciones, mismas que pudimos explicar satisfactoriamente. (4) En ausencia de un campo magnético en la dirección z, los vórtices pueden aparecer en cualquiera de las fases sin que tengamos forma de saber a priori en cuál de ellas será. Sin embargo, si se aplica un campo magnético constante en la dirección +z los vórtices aparecen en la fase '+", mientras que si lo aplicamos en la dirección -z, aparecen en la fase "-".

Es por el resultado (3) que creemos que estos vórtices no se han observado antes; es necesario separar las fases para observar el fenómeno. Así, proponemos usar un pequeño campo en la dirección z que dependa de z, de forma que su gradiente sea distinto de cero y que por ello separe las dos fases con una fuerza  $\mathbf{F} = (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla) \mathbf{B}$ , donde  $\boldsymbol{\mu}$  es el momento magnético. El campo debe ser pequeño para poder ser considerado perturbativamente, es decir, que no modifique esencialmente el problema. Si el campo es lo suficientemente grande, podría ser suficiente para generar transiciones a otros estados no poblados. Por ejemplo, en el caso del hidrógeno, poblar el duplete que consideramos vacío.

Ahora que conocemos los resultados generales, presentamos la evidencia.

#### 3.3.1. Ejemplos

En todos los ejemplos, la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP) fue resuelta usando el método propuesto por Zeng y Zhang[25]. La ecuación adimensionalizada que estamos resolviendo es:

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext}^{\pm}(\vec{r} + \vec{r}_0) + g \left( |\psi_{\pm}(\vec{r})|^2 + |\psi_{\pm}(\vec{r})|^2 \right) \right] \psi_{\pm}(\vec{r})$$
  
 
$$+ \kappa r^l e^{\pm i l \phi} \psi_{\mp}(\vec{r}) = \mu \psi_{\pm}(\vec{r})$$
 (3.20)

donde  $\psi \pm$  son las funciones de onda para las fases de spin y  $\mu$  es el potencial químico. Presentamos pues ejemplos de los resultados que obtuvimos.

#### Campo dipolar no centrado

Consideremos un condensado con dos grados internos de libertad que denotamos "+", "-". El campo magnético al que sometemos el condensado es:

$$B = \mathcal{B}(x - 4, -y + 2, 0) \tag{3.21}$$

El campo se muestra en la Figura 3.5. Notamos que tanto la divergencia como el rotacional de este campo es cero y que tiene un cero en el punto (x, y) = (4, 2).

Resolvimos la ecuación de GP en presencia de este campo con parámetros g = 8000 y  $\kappa = 0.5$ . La solución se muestra en la Figura 3.6.

La densidad de la fase "+",  $\rho_+ = |\psi_+|^2$ , se muestra en la Figura 3.6 (a); la de la fase "-",  $\rho_- = |\psi_-|^2$ , en la Figura 3.6 (b). Es en esta última que apareció el vórtice, mientras que el pico apareció en la fase "+". La densidad total se muestra en la Figura 3.6 (c) y vemos que en efecto, no se observa el vórtice en la densidad total. Vemos además que el vórtice coincide exactamente con el cero del campo magnético.



Figura 3.5: Campo magnético dipolar no centrado en unidades arbitrarias

El potencial químico es  $\mu = 46.5984 \pm 0.0002$ . Las circulaciones de las fases "+", "-", se muestran en las Figuras 3.6 (d) y (e). En este caso el vórtice tiene circulación  $\mathcal{C}/2\pi = -1$ . La circulación como función de la distancia radial se muestra en la Figura 3.6 (f). La población en las fases es  $< N_+ > /N = 0.51$  y  $< N_- > /N = 0.49$ .

#### Campo cuadrupolar

Consideremos de nuevo un condensado con dos grados internos de libertad en presencia del campo:

$$\boldsymbol{B} = \mathcal{B}(x^2 - y^2, -2xy, 0) \tag{3.22}$$

De nuevo, la divergencia y el rotacional de este campo son cero. El campo se muestra en la Figura 3.15.

Resolvimos la ecuación de GP en presencia de este campo con parámetros g = 1000 y  $\kappa = 0.2$ . La densidad de la fase "+" se muestra en la Figura 3.8 (a); la de la fase "-", en la Figura 3.8 (b). De nuevo, es en esta última que apareció el vórtice, mientras que el pico apareció en la fase "+".

La densidad total se muestra en la Figura 3.8 (c) y vemos que en efecto, no se observa el vórtice. Vemos además que el vórtice coincide exactamente con el cero del campo magnético. La circulación del vórtice se muestra en la Figura 3.8 (d) y vimos que es  $C/2\pi = -2$ . La población en las fases es  $< N_+ > /N = 0.58$  y  $< N_- > /N = 0.42$  y el potencial químico es  $\mu = 13.9 \pm 0.3$ .



Figura 3.6: Condensado para campo dipolar no centrado[16]. Esta figura muestra la formación de un vórtice de carga uno en el punto (4,2), que coincide con el cero del campo magnético. Las figuras (a) y (b) son las densidades en las fases "+", "-", respectivamente. La figura (c) muestra como la densidad total no muestra la aparición de vórtices. La figura (d) y (e) son los campos de velocidad correspondientes alrededor del punto (4,2). La figura (f) es el valor de la circulación para ambas fases como función de la distancia radial al punto (4,2).



Figura 3.7: Campo magnético cuadrupolar en unidades arbitrarias

#### Campo dipolar centrado con campos longitudinales

Para mostrar el resultado de que podemos controlar la fase en la que aparecen los vórtices al usar un campo longitudinal  $B_z = \mathcal{B}z_0$  (resultado 4), resolvimos la ecuación de GP para un campo dipolar con campos transversales distintos de cero y con parámetros g = 1000 y  $\kappa = 0.2$ . De nuevo trabajamos con dos grados internos de libertad. Los campos con los que trabajamos son:

$$\boldsymbol{B} = \mathcal{B}(x, -y, z_0) \tag{3.23}$$

En las Figuras 3.9 (a) y (b) se muestra la densidad de la fase "+", "-", respectivamente, en el caso  $z_0 = +1$ . El potencial químico en este caso es  $\mu = 29.8472 \pm 0.0001$  y las poblaciones son  $\langle N_+ \rangle /N = 0.37$  y  $\langle N_- \rangle /N = 0.63$ . En este caso, el vórtice se forma en la fase "+", con circulación  $C/2\pi = 1$ , tal y como se esperaba.

En las Figuras 3.9 (c) y (d) se muestra la densidad de las fases "+", "-", en el caso  $z_0 = -1$ . El potencial químico en este caso es  $\mu = 29.8562 \pm 0.0001$ y las poblaciones son  $\langle N_+ \rangle /N = 0.63$  y  $\langle N_- \rangle /N = 0.37$ . En este caso, el vórtice se forma en la fase "-", con circulación  $C/2\pi = -1$ , tal y como se esperaba.

#### Ocho cables infinitos

En nuestro intento de realizar campos magnéticos realizables en el laboratorio, estudiamos el campo generado por ocho cables «infinitos» con corrientes



Figura 3.8: Codensado con campo cuadrupolar[16]. Esta figura muestra la formación de un vórtice en el centro del condensado con circulación dos usando un campo cuadrupolar. Las figuras (a) y (b) son las densidades en las fases "+", "-", respectivamente. La figura (c) muestra como la densidad total no muestra la aparición de vórtices. La figura (d) y (e) son los campos de velocidad correspondientes alrededor del punto (0,0). La figura (f) es el valor de la circulación para ambas fases como función de la distancia radial al punto (0,0).



Figura 3.9: Condensado dipolar con diferentes campos longitudinales[16]. Este caso ilustra que es posible decidir la fase en la que aparecen los vórtices usando un campo magnético transversal. Las figuras (a) y (b) son, respectivamente, las componentes "+", "-", en el caso de campo transversal positivo en la dirección z. Las figuras (c) y (d) muestran el análogo con campo magnético negativo en la dirección z.

de diferentes magnitudes y direcciones. De nuevo trabajamos con dos grados internos de libertad y el campo transversal en la dirección z es cero. Los ceros del campo se escogieron en  $r_1 = (3.6, -6.1), r_2 = (-6.6, 0)$  y  $r_3 = (3.6, 6.1)$ . En este caso, g = 1000 y  $\kappa = 0.2$ .

El campo que obtuvimos tiene tres ceros. En la fase "+", aparece un vórtice con circulación positiva,  $C/2\pi = 1$ , y dos vórtices en la fase "-", con circulación negativa,  $C/2\pi = -1$ . Las densidades de las fases "+", "-", con los vórtices se muestran en las figuras 3.10 (a) y (b) respectivamente. La densidad total queda, de nuevo, inalterada (ver Figura 3.10 (c)). Las circulaciones se muestran en las Figuras 3.10 (c) y (d). El potencial químico en este caso es  $\mu = 53.4084 \pm$ 0.0002 y las poblaciones son  $< N_+ > /N = 0.525$  y  $< N_- > /N = 0.475$ .

#### Condensado con tres grados de libertad

Considermos un condensado con tres grados internos de libertad. El condensado está en presencia de un campo dipolar como en el primer ejemplo, excepto que ahora el campo está centrado en el origen.

En este caso, g = 8000 y  $\kappa = .5$ . La densidad de la fase "+", se muestra en la Figura 3.11 (a); la de la fase "-", en la Figura 3.11 (b); la de la fase "0", en la Figura 3.11 (c). Las circulaciones de los vórtices se muestran en las Figuras 3.11 (d) y (e). Para la fase "+", la circulación es  $C/2\pi = 1$ ; para la "-",  $C/2\pi = -1$ . En la fase 0 se forma la acumulación de densidad. El potencial químico en este caso es  $\mu = 47.1020 \pm 0.0003$  y las poblaciones son  $< N_+ > /N = 0.25$  y  $< N_- > /N = .25$  y  $< N_0 > /N = 0.5$ .

#### Campo con red triangular

Considremos un condensado con dos grados internos de libertad en presencia del campo:

$$\boldsymbol{B} = \mathcal{B}(\sin(\pi x/\lambda)\cos(\pi y/\lambda), -\sin(\pi y/\lambda)\cos(\pi x/\lambda), \pm z_0)$$
(3.24)

donde  $\lambda$  es una cantidad con unidades de longitud. El campo se muestra en la Figura 3.12. En este caso, g = 8000 y  $\kappa = 2$ .

La densidad de las fases "+", "-" para el caso  $z_0 = 0$  se muestran en las Figuras 3.13 (a) y (d). El potencial químico en este caso es  $\mu = 49.5221 \pm 0.0003$  y las poblaciones son  $\langle N_+ \rangle / N = 0.62$  y  $\langle N_- \rangle / N = 0.38$ .

Para el caso  $z_0 = +5$  se muestran en las Figuras 3.13 (b) y (e). El potencial químico en este caso es  $\mu = 40.3934 \pm 0.0006$  y las poblaciones son  $\langle N_+ \rangle /N = 0.004$  y  $\langle N_- \rangle /N = 0.996$ .

Finalmente, para el caso  $z_0 = -5$  se muestran en las Figuras 3.13 (c) y (f). El potencial químico en este caso es  $\mu = 40.3934 \pm 0.0006$  y las poblaciones son  $\langle N_+ \rangle / N = 0.996$  y  $\langle N_- \rangle / N = 0.004$ .

Estas figuras de nuevo muestran que en ausencia de un campo magnético transversal, no se puede saber a priori en que fase se forman los vórtices, mientras que en presencia de un campo magnético en la dirección  $\pm z_0$  podemos predecir dónde se nuclearán.



Figura 3.10: Condensado hecho con cables[16]. Esta figura muestra la formación de vórtices usando ocho cables infinitos con diferentes direcciones y magnitudes de tal forma que se formen tres ceros en el campo magnético. Los ceros coinciden con el campo magnético y tienen carga  $\pm 1$ . También ilustra que sin campo magnético en la dirección z, los vórtices pueden nuclearse en la fase que sea, mostrando así un rompimiento espontaneo de la simetría. Las figuras (a) y (b) son las densidades en las fases "+", "-", respectivamente. La figura (c) muestra como la densidad total no muestra la aparición de vórtices. La figura (d) y (e) son los campos de velocidad correspondientes alrededor de los puntos donde aparecen los vórtices. La figura (f) es el valor de la circulación para ambas fases como función de la distancia radial a cualquiera de los puntos donde se nuclean vórtices en ambas fases.



Figura 3.11: Condensado con tres grados de libertad[16]. Esta figura muestra la formación de vórtices en un condensado con tres grados de libertad. Las figuras (a) y (b) son las densidades en las fases "+", "-", respectivamente. La figura (c) muestra la densidad en la fase "0". La figura (d) y (e) son los campos de velocidad correspondientes alrededor de los puntos donde aparece el vórtice. La figura (f) es el valor de la circulación para ambas fases como función de la distancia radial a cualquiera de los puntos donde se nuclean vórtices en las tres fases.



Figura 3.12: Campo con red triangular

Un rasgo interesante de este campo es que tiene ceros que se acomodan en una red triangular. Veamos por qué.

Notamos que el campo se hace cero en dos «tipos» de puntos:

- 1.  $(x, y) = (\pm n\lambda, \pm m\lambda)$ , con m,n enteros.
- 2.  $(x,y) = (\pm \frac{2j+1}{2}\lambda, \pm \frac{2k+1}{2})\lambda)$ , con j,k enteros.

Así, estos diferentes tipos de cero se intercalan para formar la red.

Otro resultado diferente de este campo que lo hace especial es que pueden formarse vórtices con circulación  $C = \pm 2\pi$  en cualquiera de las fases. Hasta ahora, los vórtices con circulación positiva se formaban en la fase "+"; los de circulación negativa en la "-". Como veremos, en este caso, todos los ceros de tipo m,n enteros dan vórtices con circulaciones positivas en la fase "+"; negativas en la "-". Por otro lado, los ceros de tipo semientero dan vórtices con circulaciones negativas en la fase "+"; positivas en la "-". Una de nuestras contribuciones es poder explicar la formación de vórtices de forma que este caso es un resultado predecible de la teoría. Estudiemos pues esta explicación.

#### 3.3.2. Explicación semianalítica

Para entender por qué aparecen los vórtices y por qué si un vórtice aparece en una fase entonces en la otra no, desarrollamos una explicación semianalítica inspirada en la explicación de la aparición de vórtices en superconductores tipo II propuesta por A. Abrikosov[8]. Para desarrollar nuestra explicación, primero estudiamos el comportamiento de las soluciones tipo vórtice en una sóla fase.



Figura 3.13: Condensado con red triangular [16]. Esta figura muestra la formación de redes de vórtices usando campos con ceros acomodados en redes. De nuevo mostramos que los vórtices aparecen en los los ceros del campo magnético. Las figuras de la izquierda representan las densidades de la fase "+", mientras que las de la derecha representan la de la fase "-". En el primer renglón se muestran estas densidades en ausencia de un campo transversal, mientras que los siguientes reglones muestran las densidades cuando se aplica un campo en la dirección z.

Después trabajamos con la ecuación completa, es decir, con dos componentes y así explicamos el fenómeno que observamos.

#### La esencia de la formación de vórtices

Empezamos con una sóla fase en la ecuación de Gross-Pitaevskii, es decir, no consideramos la parte de spin, para entender la esencia de las soluciones tipo vórtice.

Proponemos que cerca del vórtice la solución es de la forma

$$\Phi = e^{\pm qi\phi} f(r) \tag{3.25}$$

Para que sea solución debemos pedir que no diverja cerca de cero. Introduciendo la propuesta en el hamiltoniano de Gross-Pitaevskii,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{q^2}{r^2}f\right] + gf^3 - \mu f = 0$$
(3.26)

Así, proponemos

$$f = \sum_{n} a_n r^n \tag{3.27}$$

 $con \ n = 1, 2, 3....$ 

Notamos que

$$\left[\frac{1}{r}(rf')' - \frac{q^2}{r^2}f\right] = \sum_n (n^2 - q^2)a_n r^{n-2}$$
(3.28)

Así, si esta parte de la ecuación no diverge, la otra parte tampoco pues la función f entra con potencias al cubo o sin potencia y sólo acompañada de constantes. Así pues,

$$\sum_{n} (n^2 - q^2) a_n r^{n-2} = (1 - q^2) a_1 \frac{1}{r} + (4 - q^2) a_2 + (9 - q^2) a_3 r + (16 - q^2) a_4 r^2 + \dots$$
(3.29)

por lo tanto,

1.  $q = 1 \Rightarrow f \approx r$ 2.  $q = 2 \Rightarrow f \approx r^2$ 3.  $q = k \Rightarrow f \approx r^k$ 

y los términos superiores ya no divergen, de modo que al ajustar los coeficientes, obtenemos una solución de la ecuación.

Ahora, notamos entonces que para esta solución, la circulación es:

$$\mathcal{C} = q \oint \nabla \phi \cdot \mathbf{dl} = q \oint \frac{\hat{\phi}}{r} \cdot \mathbf{dl} = 2\pi q$$
(3.30)

Con esto se explica la esencia de los vórtices. Son soluciones tales que son cero en el vórtice y cuya circulación es no nula. La idea ahora es utilizar esto para explicar el comportamiento de la solución de Gross-Pitaevski en el caso de dos grados de libertad y en presencia de un campo magnético.

## La ecuación de Gross-Pitaevskii para un condensado multicomponente

Ya que entendemos la esencia de la formación de vórtices, estudiamos la ecuación de GP para el condensado multicomponente. Esto nos permitirá entender los resultados que enumeramos al inicio de este capítulo.

Consideremos la ecuación completa, es decir, Gross-Pitaevski con el término de spin que presentamos en la sección de propiedades magnéticas de los átomos. Recordemos que esta ecuación era:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \mu + \mu_0 \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{B}(r)\right] \begin{pmatrix} \psi_+\\ \psi_- \end{pmatrix} = 0$$
(3.31)

donde  $J \in I$  son los spines electrónico y nuclear,  $\mu$  el potencial químico.

Consideremos de momento el campo:

$$\boldsymbol{B} = B[(x - x_0)\hat{x} - (y - y_0)\hat{y}] + B_0\hat{z}$$
(3.32)

Desarrollando el término del campo magnético obtenemos:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \mu + \mu_0 B_0\right]\psi_+ + \mu_0 Br e^{i\phi}\psi_- = 0 \qquad (3.33)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g(|\psi_-|^2 + |\psi_-|^2) - \mu - \mu_0 B_0\right]\psi_- + \mu_0 Br e^{-i\phi}\psi_+ = 0 \quad (3.34)$$

Así, si queremos que la solución tenga carga entera (circulación entera), planteamos:

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{i\phi}f_+\\ f_- \end{pmatrix} \tag{3.35}$$

Las soluciones con cargas semienteras también son posibles pero de momento no las tratamos porque no son univaluadas (esta es una de las líneas de investigación que propondré más adelante). Sustituyento esta propuesta en la ecuación, obtenemos:

$$\left[\frac{-\hbar^{2}}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial}{\partial r})-\frac{1}{r^{2}}+V+g(|f_{+}|^{2}+|f_{-}|^{2})-\mu+\mu_{0}B_{0}\right]f_{+}+\mu_{0}Brf_{-}=0 \quad (3.36)$$

$$\left[\frac{-\hbar^{2}}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial}{\partial r}) + V + g(|f_{+}|^{2} + |f_{-}|^{2}) - \mu - \mu_{0}B_{0}\right]f_{-} + \mu_{0}Brf_{+} = 0 \quad (3.37)$$

Así, la solución radial cerca de cero es  $f_+ \approx C_+ r$  y  $f_- \approx C_-$ .

Esta constante  $C_{-}$  es el pico que se observa en las soluciones. Recordemos que en el modelo lineal aparecían soluciones tales que una fase era cero en cero y la otra no. ¿Recuerdan que les pedí que lo recordaran? En el problema lineal una de las fases presenta vórtice y la otra un pico, el pico es el valor en r = 0 de la función que no tiene vórtice. Así, esta constante es el análogo en el modelo con interacción del pico que observamos en el modelo lineal.

Notamos entonces que sólo la parte  $f_+$  tiene solución tipo vórtice pues el término  $-1/r^2$  ya no aparece para  $f_-$ .

Este desarrollo puede generalizarse para una familia de campos magnéticos de la que este campo forma parte. Esta familia de campos permite construir soluciones con la carga que se desee. Así, no sólo podemos localizar el vórtice donde se desee sino que podemos darle la carga que querramos. Para ver cómo es que esto sucede, primero estudiemos la familia de campos multipolares que determinan la carga.

#### 3.3.3. Campos multipolares y control de la carga del vórtice

Ahora que entendemos por qué se están formando los vórtices, podemos introducir la forma en que controlamos la carga de los mismos. Para ello, como dijimos, debemos controlar el orden multipolar de los campos magnéticos. Para hacerlo, trabajamos con una familia de campos que son combinaciones lineales de armónicos esféricos del mismo orden. Como veremos, la carga total del condensado en ambas fases queda determinado por el orden multipolar del campo.

Estudiemos estonces los primeros miembros de esta familia de campos para entender por qué controlan la carga de los vórtices.

#### Dipolar

El campo dipolar con el que trabajamos en los ejemplos de la sección anterior se escribe, como combinación de armónicos esféricos, como:

$$B_x = \mathcal{B}x = \mathcal{B}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r(Y_1^{-1} - Y_1^1)$$
(3.38)

$$B_y = -\mathcal{B}y = -i\mathcal{B}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}r(Y_1^{-1} + Y_1^1)$$
(3.39)

Le llamamos dipolar porque se forma con armónicos esféricos de orden uno. Mostramos el campo en la Figura 3.14.

#### Cuadrupolar

El campo cuadrupolar con el que trabajamos en los ejemplos de la sección anterior se escribe, como combinación de armónicos esféricos, como:

$$B_x = \mathcal{B}x^2 - y^2 = 4\mathcal{B}\sqrt{\frac{\pi}{30}}r^2(Y_2^{-2} + Y_2^2)$$
(3.40)

$$B_y = -\mathcal{B}2xy = -2i\mathcal{B}\sqrt{\frac{\pi}{30}}r^2(Y_2^{-2} - Y_2^2)$$
(3.41)

Le llamamos cuadrupolar porque se construye con armónicos esféricos de orden dos. Este campo se muestra en la Figura 3.15.



Figura 3.14: Campo dipolar

#### Octupolar

El campo octupolar se contruye con armónicos esféricos de orden tres.

$$B_x = \mathcal{B}(x^2 - 3y^2)x = 4\mathcal{B}\sqrt{\frac{2\pi}{70}}r^3(Y_3^{-3} - Y_3^3)$$
(3.42)

$$B_y = -\mathcal{B}(3x^2 - y^2)y = -i4\mathcal{B}\sqrt{\frac{2\pi}{70}}r^3(Y_3^{-3} + Y_3^3)$$
(3.43)

Este campo se muestra en la Figura $\ 3.16$ 

#### Hexadecupolar

El campo octupolar se contruye con armónicos esféricos de orden cuatro.

$$B_x = \mathcal{B}(x^2(x^2 - 3y^2) - y^2(3x^2 - y^2)) = \mathcal{B}\frac{16}{3}\sqrt{\frac{\pi}{70}}r^4(Y_4^{-4} + Y_4^4)$$
(3.44)

$$B_y = -\mathcal{B}4xy(x^2 - y^2) = -i\mathcal{B}\frac{16}{3}\sqrt{\frac{\pi}{70}}r^4(Y_4^{-4} - Y_4^4)$$
(3.45)

#### Generalización

Así, podemos ver que el campo multipolar es en general

$$B_x = A_l r^l (Y_l^{-l} + (-1)^l Y_l^l)$$
(3.46)

$$B_y = -iA_l r^l (Y_l^{-l} - (-1)^l Y_l^l)$$
(3.47)



Figura 3.15: Campo cuadrupolar

#### Control de la carga del vórtice

Les prometo, la construcción de estos campos no es ociosidad. La razón de hacerlo es que el orden multipolar del campo nos permitirá asociarle al vórtice la carga que deseemos. Ésta es la segunda característica de nuestra propuesta que prometí que explicaríamos. Para ello, veamos cómo se ven estos campos en nuestro hamiltoniano. Notemos que:

$$Y_{l}^{\pm l} = (-1)^{l} e^{\pm i l \phi} sen^{l}(\theta)$$
(3.48)

pero estamos en el plano x - y, por lo que  $\theta = \pi/2$ . Por lo tanto

$$Y_l^{\pm l} = (-1)^l e^{\pm i l \phi} \tag{3.49}$$

Así pues, para el caso de spin1/2, tenemos que para cualquier número cuántico l

$$B_x S_x + B_y S_y = \frac{\hbar}{2} (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y) = \hbar \mathcal{B} r^l \begin{pmatrix} 0 & e^{il\phi} \\ e^{-il\phi} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.50)

Notamos entonces que el campo magnético determina la carga total de la solución en ambas fases. Decimos esto porque recordamos que las exponenciales en el problema lineal eran las resposables de fijar la carga del sistema. Todo esto quedará claro en unas líneas cuando desarrollemos la solución para el problema no lineal.

Así, con los resultados anteriores, la ecuación de Gross-Pitaevski para nuestro problema con carga arbitraria l es:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g(|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) - \mu + \mu_0 B_0\right]\psi_+ + \mu_0 Br^l e^{il\phi}\psi_- = 0 \quad (3.51)$$



Figura 3.16: Campo octupolar

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V + g(|\psi_-|^2 + |\psi_-|^2) - \mu - \mu_0 B_0\right]\psi_- + \mu_0 Br^l e^{-il\phi}\psi_+ = 0 \quad (3.52)$$

Así, en analogía con el caso l = 1, planteamos

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{il\phi}f_+\\ f_- \end{pmatrix}$$
(3.53)

Vemos entonces que la solución tendrá carga l. Ahora, sustituyento esta propuesta en la ecuación, obtenemos

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{l^2}{r^2} + V + g(|f_+|^2 + |f_-|^2) - \mu + \mu_0 B_0] f_+ + \mu_0 B r^l f_- = 0 \quad (3.54)$$
$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} (\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial}{\partial r})) + V + g(|f_+|^2 + |f_-|^2) - \mu - \mu_0 B_0] f_- - \mu_0 B r^l f_+ = 0 \quad (3.55) \end{bmatrix}$$

Así, la solución radial cerca de cero es  $f_+ \approx C_+ r^l$  y  $f_- \approx C_-$ . Es decir, la solución tiene un vórtice de carga q = l en la fase "+"; acumulación en la fase "\_".

Hasta ahora, parece que las soluciones se comportan igual que en el caso l = 1 sólo que con mayor circulación. *Sin embargo*, notamos que estas ecuaciones también admiten soluciones de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{ia\phi}f_+\\ e^{ib\phi}f_- \end{pmatrix}$$
(3.56)

donde a = b+l, de manera que *aparecen vórtices en ambas fases*. Así pues, incluso en este caso, el orden multipolar del campo determina la carga total de la solución, a saber, l.

¿Cuántas soluciones son entonces? Notamos que si en la fase "+"hay carga l entonces en la otra fase debe haber carga cero; si en la primera hay carga l-1, entonces en la "-"hay carga -1 y así sucesivamente. Por esta razón hay l+1 soluciones. Pero, ¿son todas válidas?

¿Recuerdan que en el problema lineal para cualquier número cuántico m mayor que uno sólo era posible obtener soluciones que son cero en cero en ambas fases? Es decir, en el problema lineal para números cuánticos superiores, ambas soluciones presentan vórtice. Esto ya no es cierto en el caso no lineal. En el lineal podíamos invocar al teorema de unicidad de modo que la solución obtenida por separación de variables debía ser la única. Ahora no tenemos ese resultado y en principio todas las soluciones son válidas. Así pues, notamos entonces que la aparición de un vórtice en una fase y en la otra no, es una particularidad de los campos con carga total uno.

Estos resultados pueden extenderse fácilmente a condensados con tres grados de libertad. Para ello notamos que de manera totalmente análoga al caso de dos grados internos de libertad, el término magnético en la ecuación de Gross-Pitaevskii es

$$S_x B_x + S_y B_y = \mathcal{B}_l r^l \begin{pmatrix} 0 & e^{il\phi} & 0\\ e^{-il\phi} & 0 & e^{il\phi}\\ 0 & e^{-il\phi} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.57)

En este caso, las soluciones son de la forma

$$\begin{pmatrix} \psi_{+1} \\ \psi_{0} \\ \psi_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{+1}e^{ia\phi} \\ f_{0}e^{ic\phi} \\ f_{-1}e^{ib\phi} \end{pmatrix}$$
(3.58)

donde a = c + l y b = c - l. Así, de nuevo hay l + 1 soluciones para la ecuación de GP en el caso de spin 1. Cabe mencionar que con nuestro método sólo encontramos soluciones de la forma a = 1, b = -1 y c = 0, sin embargo se han encontrado soluciones con diferentes distribuciones de carga en la literatura[28], por ejemplo, a = 0, b = -2 y c = -1.

Con esto último, completamos la explicación de la formación vórtices en nuestra propuesta. Ahora, como otra aplicación que muestra la generalidad de nuestra explicación, usemos la teoría desarrollada para explicar por qué en la red triangular se forman vórtices con cargas positivas y negativas en la misma fase. ¿Recuerdan que en el ejemplo de la red triangular los ceros del campo magnético caracterizado por m, n enteros daban vórtices con circulación positiva en la fase "+"; negativa en la "—", y que esto se invertía para los ceros semienteros? Estudiemos esto.

#### Vórtices en la red triangular: circulaciones alternantes

Recordemos que el campo periódico con el que trabajamos es:

$$\boldsymbol{B} = \mathcal{B}(\sin(\pi x/\lambda)\cos(\pi y/\lambda), -\sin(\pi y/\lambda)\cos(\pi x/\lambda))$$
(3.59)

donde  $\lambda$  es una cantidad con dimensiones de longitud y de momento no nos interesa el término constante en la dirección z.

Este campo se hace cero linealmente en los puntos:

- 1.  $(x, y) = (\pm n\lambda, \pm m\lambda)$ , con m,n enteros.
- 2.  $(x, y) = (\pm ((2j+1)/2)\lambda, \pm ((2k+1)/2)\lambda), \text{ con j,k enteros.}$

En el primer caso, los vórtices tienen circulación positiva en la fase "+"; negativa en la "-". La situación se invierte para los ceros del segundo tipo. ¿Por qué ocurre esto?

Estudiemos más de cerca el comportamiento del campo cerca de los ceros. Notamos que en el primer caso, las funciones sin y cos se comportan como

$$\sin(x+n\pi) \approx (-1)^n x \tag{3.60}$$

$$\cos(x + n\pi) \approx (-1)^n \tag{3.61}$$

donde x está cerca de cero de forma que el comportamiento periódico es absorbido en los signos alternantes.

Para el caso dos (semientero), las funciones sin y cos se comportan distinto

$$\sin(x + \frac{2j+1}{2}\pi) \approx (-1)^j \tag{3.62}$$

$$\cos(x + \frac{2j+1}{2}\pi) \approx -(-1)^j x$$
 (3.63)

Al introducir estos comportamientos cerca de cero en la fórmula del campo magnético, obtenemos que para el caso uno (ambos enteros) el campo se ve como

$$\boldsymbol{B} = (-1)^{n+m} (x, -y) \tag{3.64}$$

mientras que para el caso semientero se ve como

$$\boldsymbol{B} = (-1)^{j+k}(-y,x) \tag{3.65}$$

Así, al introducir esto en el término magnético de la ecuación de GP obtenemos para el caso entero

$$\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B} = \mathcal{B}_l(-1)^{m+n} r^l \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.66)

de modo que, usando las reglas para la formación de vórtices, notamos que se formarán vórtices de carga positiva en la fase "+"; negativa en la fase "-".

Para el caso semientero obtenemos

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \mathcal{B}_l i (-1)^{j+k} r^l \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.67)

Así, notamos que se formarán vórtices de carga negativa en la fase "+"; positiva en la fase "-". Con esto explicamos la alternancia de la carga usando el mismo marco teórico desarrollado para los demás casos.

Así, terminamos el proyecto de investigación hasta ahora. Sin embargo, el resolver estas preguntas trajo consigo otras. A continuación plantearemos brevemente algunas preguntas abiertas que nos interesan.

## Capítulo 4

## Líneas de investigación futura

El trabajo hasta ahora realizado deja muchas preguntas abiertas. Por ejemplo, aprendimos que las ecuaciones de nuestro modelo tienen más de una solución ¿serán todas válidas? Otra pregunta abierta es el uso de campos magnéticos dependientes del tiempo, ¿qué resultará de esto? Tampoco consideramos el uso de campos eléctricos, ¿qué pasa si usamos láseres en vez de campos magnetostáticos?

Por otro lado, existe la posibilidad de usar nuestro modelo para contribuir a la comprensión de fenómenos como la turbulencia. Parece intuitivo pensar que una vez que los vórtices se forman, el agitarlos fuertemente genera la turbulencia cuántica[29].

Estas son las principales lineas de investigación que consideramos. Naturalmente, es posible que encontremos cosas mucho más interesantes en el camino, jya veremos! Veamos pues algunas de estas líneas de investigación.

### 4.1. Estabilidad

Como vimos, el hamiltoniano de Gross-Pitaevskii con campos multipolares de orden mayor que uno acepta soluciones de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{ia\phi}f_+\\ e^{ib\phi}f_- \end{pmatrix}$$
(4.1)

donde a = b + l. Las soluciones numéricas con las que hemos trabajado indican que las soluciones con carga par son más difíciles de obtener. ¿Es esto sólo casualidad?

Para explicar esto, consideremos el problema de Longuett-Higgins. En Longuett-Higgins aprendimos que las soluciones para números cuánticos superiores eran de tal forma que las ecuaciones quedaban

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) - \frac{m^2}{r^2} \psi\right] + V\psi + \kappa r\phi = E\psi \tag{4.2}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \phi\right) - \frac{(m+1)^2}{r^2} \phi\right] + V\phi + \kappa r \psi = E\phi \tag{4.3}$$

Notamos que el número cuántico m juega el papel de la carga de la fase. Así, las soluciones del problema sin interacción son aquéllas en las que ambas fases difieren en una unidad de carga.

En caso de que las soluciones «naturales» al problema se comporten así, notamos que para campos magnéticos con carga total uno, una fase debe tener carga cero y otra uno; para campos con carga total dos, no existe solución natural y así sucesivamente. Así pues, sólo los campos con carga total impar dan soluciones naturales. ¿Está relacionada la «naturalidad» de la solución con su estabilidad y es por eso que fue más difícil encontrarla?

### 4.2. Carga semientera

Las ecuaciones que planteamos también aceptan soluciones semienteras. Proponemos

$$\Phi = e^{\pm qi\phi} f(r) \tag{4.4}$$

Introduciendo la propuesta en el hamiltoniano de Gross-Pitaevskii,

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{q^2}{r^2}f\right] + gf^3 - \mu f = 0$$
(4.5)

Así, proponemos n = 1/2, 3/2, 5/2... y

$$f = \sum_{n} a_n r^n \tag{4.6}$$

donde n avanza de uno en uno, es decir, una serie de potencias semienteras. Notamos que

$$\left[\frac{1}{r}(rf')' - \frac{q^2}{r^2}f\right] = \sum_n (n^2 - q^2)a_n r^{n-2}$$
(4.7)

Así, si este término no diverge, los otros tampoco pues son de mayor orden que éste.

Para el caso semientero,

$$\sum_{n} (n^2 - q^2) a_n r^{n-2} =$$
(4.8)

$$= \left(\frac{1}{4} - q^2\right)a_{1/2}r^{-3/2} + \left(\frac{9}{4} - q^2\right)a_{3/2}r^{-1/2} + \left(\frac{25}{4} - q^2\right)a_{5/2}r^{1/2} +$$
(4.9)

$$+\left(\frac{49}{4}-q^2\right)a_{7/2}r^{3/2}+\frac{24}{4}a_{5/2}r^{1/2}+\dots$$
(4.10)

por lo tanto

1. 
$$q = 1/2 \Rightarrow f \approx r^{1/2}$$
  
2.  $q = 3/2 \Rightarrow f \approx r^{3/2}$   
3.  $q = k \Rightarrow f \approx r^k$ 

Como mencionamos antes, estas soluciones no son univaluadas pero siguen siendo soluciones. Estas soluciones podrían presentar efectos interesantes que se parezcan, por ejemplo, a la precesión del spin en un campo magnético, donde la función de onda de spin adquiere una fase al rotar  $2\pi$  sobre z.

¿Podrían los vórtices modelar electrones en una gelatina neutralizante? Este modelo, conocido como el jellium model, es muy utilizado en Física de Estado Sólido como aproximación a los electrones en bandas conductoras[47]. ¿Podría ser aplicado aquí? Este tema está muy en voga en estas fechas y, de hecho, muchos de los experimentos con condensados de Bose-Einstein se hacen con la idea de aprovechar la coherencia de estos condensados para explicar propiedades de sistemas de estado sólido[13, 14].

Así pues, podría ser interesante analizar estas soluciones para ver si modelan casos aún no explorados.

### 4.3. Potenciales dependientes del tiempo

Nuestra investigación hasta ahora ha sido con campos magnetostáticos, sin embargo, existe la posibilidad de trabajar con campos dependientes del tiempo. Existen varios potenciales de interés que dependen del tiempo. Uno de estos campos es el campo de una trampa TOP (time-averaged orbiting potential). Este campo consiste en un campo magnético oscilante superpuesto al campo dipolar. Así, el campo magnético total en su versión en 3D es:

$$\boldsymbol{B} = (Bx + B_0 \cos \omega t, By + B_0 \sin \omega t, -2Bz) \tag{4.11}$$

o, en la versión 2D,

$$\boldsymbol{B} = (Bx + B_0 \cos \omega t, -By + B_0 \sin \omega t, Bz_0) \tag{4.12}$$

donde  $z_0$  es una constante. En ambos casos  $B_0$  es pequeño comparado con B.

Debido a que conservamos el campo magnetostático dipolar, esperamos la aparición de un vórtice en el origen. Ahora, gracias al campo magnético oscilante, esperamos, en analogía con el problema de resonancia magnética de spin, que la población entre las fases oscile con la frecuencia de Rabi del sistema de precesión de spin, a saber,

$$\Omega = \sqrt{\left(\frac{\gamma^2}{\hbar^2}\right) + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$
(4.13)

$$\omega_{21} = \mu_B B_0 \tag{4.14}$$

$$\gamma = -\frac{1}{2}\mu_B B_1 \tag{4.15}$$



Figura 4.1: Variación temporal de la población[19].

Este potencial entonces nos da la posbilidad de aún mayor control debido a que si la frecuencia es igual a la de resonancia  $\omega_{21}$ , entonces para tiempos dados por

$$t = \frac{(2n+1)\pi\hbar}{2\gamma} \tag{4.16}$$

la población se encontrará toda en la fase "+", mientras que en tiempos dados por

$$t = \frac{2n\pi\hbar}{\gamma} \tag{4.17}$$

la población se encontrará toda en la fase "–". Este comportamiento se ilustra en la Figura 4.1 copiada de la ref.[19], donde  $|c_1(t)|^2 \ge |c_2(t)|^2$  son las probabilidades de encontrar al sistema en la fase menos y más respectivamente.

Si éste es el caso, esto debería permitirnos observar los vórtices sin necesidad de separar las fases pues una de ellas estaría despoblada. Así, los vórtices se verían aparecer poco a poco conforme se despuebla una de las fases. Este comportamiento sería periódico y por lo tanto, probablemente, más fácil de observar. Esta podría ser una propuesta interesante para los experimentales, ¡pero antes debemos hacer los cálculos!

### 4.4. Turbulencia y computación cuántica

Esperamos que una aplicación importante de nuestro trabajo sea contribuir a la explicación de la formación de turbulencia cuántica[29]. Es intuitivo pensar

con

у

que una vez que se hayan formado los vórtices con el mecanismo que describimos, entonces el agitarlos fuertemente genere la turbulencia. Es una de las líneas de investigación que consideramos más relevantes debido al gran interés de la comunidad científica en este tema.

Por otro lado está la aplicación a la computación cuántica. Los que se dedican a desarrollar programas ya contemplan como usar estos condensados para hacer cálculos. Por ejemplo, [30] usa condensados de Bose-Einstein con dos grados de libertad para hacer operaciones con «qubits» (el análogo continuo del bit). ¿Podríamos contribuir en esta área utilizando el control que hemos ganado a raíz de nuestra investigación?

### Capítulo 5

## Conclusiones

Nuestro equipo descubrió una forma de colocar vórtices - en donde se desee y con la carga que se desee - en condensados de Bose-Einstein de átomos alcalinos e hidrógeno con grados de libertad internos asociados a los momentos de spin electrónico e hiperfino de los átomos. Para lograr esto, un campo magnético constante en la dirección z se usa para separar los estados hiperfinos, para luego acoplar estos estados a un campo magnético multipolar no uniforme en las direcciones x y y. Los vórtices aparecen en los puntos donde el campo en x y y se hace cero. Ésta es nuestra contribución más importante al campo de gases ultrafríos.

Como antecedentes, estudiamos el método de generación de vórtices mediante rotación de trampa armónica. Vimos que, como mencionamos antes, el método de trampa armónica rotante genera vórtices en redes triangulares. Usando ese método no es posible controlar la posición de los vórtices en el condensado.

Como respuesta a este fenómeno, ideamos un método que nos permite colocar vórtices en donde deseemos. Vimos que para lograrlo sólo es necesario poder controlar los campos magnéticos a forma de colocar ceros donde se desee que se nucleen los vórtices. Como estos campos, en principio, están totalmente bajo control, logramos en efecto controlar la posición del vórtice.

El precio que tuvimos que pagar fue que tuvimos que trabajar con condensados con grados internos de libertad. Para obtener estos grados internos de libertad explotamos las propiedades magnéticas de los átomos alcalinos e hidrógeno. Esto nos llevó a estudiar brevemente estas propiedades, a forma de entender las aproximaciones que hacemos en nuestro modelo.

Nuestro método, además de permitir colocar vórtices, tiene otras consecuencias interesantes. Por ejemplo, dependiendo del orden multipolar del campo magnetostático, es posible controlar la carga del vórtice. Los campos de orden multipolar uno generan vórtices con carga uno; los de orden dos, de carga dos, et cetera. Ésta es, hasta donde sabemos, una novedad en el campo.

Otra consecuencia interesante es que es posible generar redes de vórtices, entre ellas la triangular de Abrikosov, pero en principio, cualquier otra que se desee. Para lograrlo, simplemente debemos ingeniárnosla para producir los campos apropiados. Como en principio podemos controlar los ceros del campo así como su orden multipolar, hablamos de ingeniería de vórtices.

Nos dimos cuenta además de que el mecanismo mediante el cual se forman los vórtices es el mismo que el descrito por Abrikosov[8]. Sin embargo, a diferencia de los vórtices en superconductores tipo II, los vórtices que proponemos se forman en los puntos donde el campo es cero. Además, los vórtices no se forman en todas las fases, es decir, si un vórtice se forma en un punto espacial en una de las fases, entonces en la otra fase no hay vórtice en ese mismo punto espacial. Vimos además que no sólo no se forma un vórtice sino que se forma un «pico» en la densidad de forma que la densidad total, la suma de las densidades en ambas fases, se mantiene en su forma gaussiana.

Es precisamente por la formación de estos picos que creemos que este fenómeno no fue observado antes. Por eso proponemos que para observar el fenómeno es necesario un pequeño campo variable en la dirección z que separe las fases. Debe ser pequeño para no causar que se pueblen niveles energéticos antes prohibidos. Con estos supuestos, esperamos que se observe experimentalmente la aparición de los vórtices que hemos descrito.

En la sección de propuesta de investigación consideramos la posiblidad de que existan «soluciones naturales» que sean más estables que las demás. Este punto podría ser interesante para comparar con los resultados de las soluciones numéricas y los experimentos que esperamos se lleven a cabo algún día.

En esta sección también comentamos sobre la posibilidad de ampliar nuestro método para incluir campos magnéticos dependientes del tiempo y campos eléctricos. Estas extensiones de nuestro modelo pueden arrojar resultados interesantes como, por ejemplo, la oscilación de la población entre las fases, permitiendo así observar los vórtices sin necesidad de separar las fases. Los vórtices se observarían cuando la población en la fase que no tiene vórtice se haga cero.

Finalmente, comentamos sobre la posible aplicación de nuestro método a la turbulencia cuántica. Vimos que una vez que los vórtices están formados, es intuitivo pensar que el agitarlos producirá la turbulencia cuántica. Debido al gran interés de la comunidad científica en este tema, consideramos esta aplicación una prioridad.

## Bibliografía

- R.Dum, J.Cirac, M.Lewenstein, P.Zoller. Creation of Dark Solitons and Vortices in Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Letters* 80, 14 (1998).
- [2] Y.Castin, R.Dum. Bose-Einstein condensates with vortices in rotating traps. Eur. Phys. Journal D 7,399-412 (1999).
- [3] M.R.Matthews et.al. Vortices in a Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.* 83, 2498-2501 (1999).
- [4] M.W.Zwierlein, J.R.Abo-Shaeer, A.Schirotzek, C.H.Shunck, W.Ketterle. Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi Gas. *Nature* 435, 1047-1051 (2005).
- [5] N.R.Cooper. Rapidly rotating atomic gases. Adv. Phys. 57, 539-616 (2008).
- [6] J.R.Abo-Shaeer, C.Raman, J.M.Vogels, W.Ketterle. Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates. *Science* 292, 476-479 (2001).
- [7] K.W.Madison, F.Chevy, W.Wohleben, J.Dalibard. Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.* 84, 806-809 (2000).
- [8] A.A.Abrikosov. On the Magnetic Properties of Superconductors of the Second Group. J. Expt. Theoret. Phys. 32, 1442-1452 (1952).
- [9] U.Essmann, H.Trauble (1967). The direct observation of individual flux lines in type II superconductors *Physics Letters A* 24, p. 526.
- [10] E.F.Yarmchuk, M.J.Gordon, R.E.Packard. Observation of stationary vortex arrays in rotating superfluid helium. *Phys. Rev. Lett.* 43, 214-217 (1979).
- [11] R.J.Donnelly (1991). Quantized Vortices in Helium II. Cambridge Studies in Low Temperatrue Physics.
- [12] A.E.Leanhardt, A.P.Chikkatur, D.Kielpinski, Y.Shin, D.E.Pritchard, W.Ketterle. Imprinting Vortices in a Bose-Einstein Condensate using Topological Phases. *Phys. Rev. Letters* 89, 19 (2002).

- [13] Y.-J. Lin, R.L. Compton, K. Jiménez-García, J.V. Porto and I.B. Spielman. Synthetic Magnetic Fields for Ultracold Neutral Atoms. *Nature Let*ters 462,628-632 (2009).
- [14] K.J.Günter, M. Cheneau, T.Yefsah, S.P.Rath, J.Dalibard. Practical Scheme for a Light-induced Gauge Field in an Atomic Bose Gas. *Physical Review* A 79, 011604(R) (2009).
- [15] Vasilievich, Muller, Ustinov (1997). The Physics of Superconductors: Introduction to Fundamentals and Applications. Springer.
- [16] R. Zamora-Zamora, M. Lozada-Hidalgo, S.F.Caballero-Benítez and V.Romero-Rochín. Vortices on demand on multicomponent Bose-Einstein condensates. arXiv:1207.1466v2 (2012).
- [17] http://www.phys.ens.fr/cct/articles/dans-livres/condensationBE-2003.pdf (agosto 2012).
- [18] C.J. Pethick and H. Smith.(2008) Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases, Cambridge University Press.
- [19] J.J. Sakurai (1994). Modern Quantum Mechanics. Addison-Wesley.
- [20] E.P.Gross. Structure of a quantized vortex in Boson systems. Il nuovo cimento 20 (1961).
- [21] L.P.Pitaevskii. Vortex lines in an imperfect Bose Gase. J. Expt. Theoret. Phys. 13 (1961).
- [22] R.Kubo (1981). Statistical Mechanics. North Holland
- [23] J. Javanainen and Janne Ruostekoski, Split-step Fourier Methods for the Gross-Pitaevski Equation. Condensed-Mat.Soft (2004).
- [24] W. Bao, I.Chern, F. Lim. Efficient and spectrally accurate numerical method for computing ground and first excited states in Bose-Einstein Condensates. *Journal of Computational Physics* **219**, 836-824 (2006).
- [25] R.Zeng, Y.Zhang. Efficiently computing vortex lattices in rapid rotating Bose-Einstein condensates. *Computer Phys. Communications* 180, 854-860 (2009).
- [26] Greiner, Neise, Stoker (1995). Thermodynamics and Statistical Mechanics. Springer.
- [27] H.C. Longuett-Higgins, U. Opik, M.H.L. Pryce, F.R.S. and R.A. Sack. Studies of the Jahn-Teller effect II. The dynamical problem. *Proc. R. Soc. Lond.* A, 1-16 (1958).
- [28] E. N. Bulgakov and A. F. Sadreev. Vortex Phase Diagram of F Å<sup>^</sup> 1 Spinor Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 200401 (2003).

- [29] E. A. L. Henn, J. A. Seman, G. Roati, K. M. F. Magalhães, and V. S. Bagnato. Emergence of Turbulence in an Oscillating Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 045301 (2009).
- [30] C.Nayak, S.H.Simon, A.Stern, M.Freedman, S.D.Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Rev. Mod. Phys.* 80, 1083-1159 (2008).
- [31] A.A.Abrikosov. Nobel Lecture, December 8, 2003.
- [32] L.R.Mohan (2002). Finite Element and Boundary Element Applications to Quantum Mechanics. Oxford University Press.
- [33] Mathar, R. J. Zernike basis to cartesian transformations. Serbian Astronomical Journal 179, 107–120 (2009).
- [34] J.Larson, E.Sjoqvist. Jahn-Teller-induced Beryy phase in spin-orbitcoupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 79, 043267 (2009).
- [35] I.B.Spielman. Raman processes and effective gauge potentials. *Phys Rev A* 79, 063613 (2009).
- [36] T.Utsumi, T.Aoki, J.Koga, M.Yamagiwa. Solutions of the 1D Coupled Nonlinear Schroedinger Equation by the CIP-BS Method. *Communications in Comp. Phys.* 1, No.2, 261-275.
- [37] V. Romero-Rochin and J.A. Cina. Time development of geometric phases in the Longuet-Higgins. J. Chem. Phys. 91, 6103 (1989).
- [38] L.R.Ram-Mohan, S.Saigal, S.Dossa, J.Shertzer. The finite element method for energy eigenvalues of quantum mechanical systems. *Computers in Physics*, jan-feb 1990.
- [39] D.V.Freilich, D.M.Bianchi, A.M.Kauffman, T.K.Languin, D.S.Hall. Real-Time Dynamics of Single Vortex Lines and Vortex Dipoles in a Bose-Einstein Condensate. *Science* **329**, 1182-1185 (2010).
- [40] V.Schweikhard, I.Coddington, P.Engels, V.P.Mogendorff, E.A.Cornell. Rapidly rotating Bose-Einstein condensates in and near the lowest Landau Level. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 040404 (2004).
- [41] W.Greiner (1998). Classical Electrodynamics. Springer, pp.85.
- [42] J. Stenger, S. Inouye, D. M. Stamper-Kurn, H.-J. Miesner, A. P. Chikkatur and W. Ketterle. Spin domains in ground-state Bose-Einstein condensates *Nature* **396**, 345 (1998).
- [43] H. -J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, J. Stenger, S. Inouye, A. P. Chikkatur, and W. Ketterle. Observation of Metastable States in Spinor Bose-Einstein Condensates *Phys. Rev. Lett.* 82, 2228 (1999).

- [44] T. -L. Ho. Spinor Bose Condensates in Optical Traps. Phys. Rev. Lett. 81, 742 (1998).
- [45] T. Ohmi and K. Machida. Bose-Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases. J. Phys. Soc. Jap. 67, 1822 (1998).
- [46] S. -K. Yip. Internal Vortex Structure of a Trapped Spinor Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 83, 4677 (1999).
- [47] G.Grosso, G.Parravicini (2003). Solid State Physics. Academic Press.
- [48] A. L. Fetter. Rotating trapped Bose-Einstein condensates. Rev. Mod. Phys. 81 647 (2009)
- [49] R.H.Landau. Quantum Mechanics II (1990).
- [50] K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda. Vortices in multicomponent Bose-Einstein Condensates. Int. J. Mod. Phys. B 19, 1835 (2005).
- [51] N. N. Klausen, J. L. Bohn, and C. H. Greene. Nature of spinor Bose-Einstein condensates in rubidium. *Phys. Rev. A* 64 053602 (2001).