



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA

**DINÁMICA DE DOMINIOS MAGNÉTICOS Y PERSISTENCIA DE LA TEXTURA
DE ESPÍN EN REDES DE MOIRÉ**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICAS)

PRESENTA:
CHRISTIAN JESUS MADROÑERO CARVAJAL

TUTORA PRINCIPAL:
DRA. ROSARIO PAREDES GUTIÉRREZ
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DRA. ANDREA VALDÉS HERNÁNDEZ
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM
DR. RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Resumen

En esta tesis se aborda el estudio trabajo teórico-computacional de la dinámica de un dominio magnético constituido de dos componentes de espín dispuestas en una red de moiré. Con base en la analogía existente entre un condensado de Bose espinorial y su contraparte perteneciente a la materia condensada, se propone un protocolo para estudiar la evolución dinámica de dominios magnéticos, particularmente se investiga la persistencia de la textura de espín. Dicha persistencia es determinada para diferentes ángulos que definen una estructura específica del patrón de moiré. La forma de abordar esta dinámica es dentro del esquema de campo medio, a través de la solución numérica de las ecuaciones acopladas de Gross-Pitaevskii para las dos componentes del espín que forman el dominio magnético. Los resultados principales del análisis, referidos a las observables de magnetización y textura de espín, permiten identificar que hay ángulos preferentes para los que los estados iniciales, es decir el dominio magnético, prevalece y por lo tanto pueden ser útiles para propósitos asociados con el almacenamiento de información en sistemas magnéticos.

Índice general

1. Introducción	1
2. Condensado de Bose espinorial con interacciones: Descripción teórica	4
2.1. Potencial interacción	5
2.1.1. Interacción de contacto	5
2.1.2. Potencial dipolar	9
2.2. Ecuación de Gross-Pitaevskii	11
2.3. Ecuación de Gross-Pitaevskii con varias componentes	16
3. Gas de Bose confinado en redes de moiré	23
3.1. Átomos neutros confinados en potenciales ópticos	23
3.2. Redes ópticas	25
3.3. Redes de moiré	27
4. Ecuación de Gross-Pitaevskii: Tratamiento numérico	29
4.1. Dimensionalidad	29
4.2. Adimensionalización de la ecuación de Gross-Pitaevskii	31
4.3. Constantes	33
4.4. Evolución en tiempo imaginario	34
4.5. Runge-Kutta de cuarto orden	36
5. Dinámica de la textura de espín en redes de moiré.	37
5.1. Observables	38
5.2. Preparación de los estados iniciales	39
5.3. Fidelidad	42
5.4. Protocolo de evolución temporal	43
5.5. Análisis	57
5.6. Conclusiones	59
5.6.1. Perspectiva	60
A. Interacción efectiva en la ecuación de Gross-Pitaevskii	61
A.1. Desarrollo en ondas parciales	61
A.2. Interacción efectiva en el espacio de momentos	62

Índice de figuras

3.1. Se presenta la red óptica en una y dos dimensiones, (a) y (b) respectivamente.	27
5.1. Estado estacionario para una red de moiré creada con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 30$ y con trampa $\tilde{\gamma} = 0.7\gamma_x$	40
5.2. Estado inicial para una red de moiré creada con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 30$ y con trampa $\tilde{\gamma} = 0.7\gamma_x$	40
5.3. Se presenta la magnetización para diferentes redes de moiré a $t = 0$. Cada recuadro tiene dos indicativos, la letra en la esquina inferior izquierda hace referencia si la red de moiré está hecha con redes cuadradas (C) o hexagonales (H). Mientras que el numero en la esquina inferior derecha hace referencia al valor del ángulo de rotación entre las redes.	41
5.4. Fidelidad como función del tiempo para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales rotadas 5 grados una respecto de la otra para diferentes trampas.	43
5.5. Fidelidad como función del tiempo para diferentes valores del ángulo de rotación. Para la red cuadrada se dibuja en tonos rojos, mientras que para la red Hexagonal se dibuja en tonos azules.	43
5.6. Magnetización izquierda (a) y derecha (b), para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación $\theta = 0$	44
5.7. Magnetización izquierda (a) y derecha (b), para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 0$	44
5.8. Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación $\theta = 40$ (a) y $\theta = 50$ (b).	45
5.9. Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 100$ (a) y $\theta = 50$ (b).	45
5.10. Estado estacionario para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 40$ (a), $\theta = 50$ (b) y para una red de hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación de $\theta = 10$ (c), $\theta = 50$ (d). Todas tienen una trampa $\tilde{\gamma} = \gamma_x$	46
5.11. Magnetización para una red de moiré hecha con redes cuadradas y ángulos de rotación $\theta = 5$ (a), $\theta = 10$ (b), $\theta = 15$ (c), $\theta = 20$ (d).	47
5.12. Magnetización para una red de moiré hecha con redes hexagonales y ángulos de rotación $\theta = 5$ (a), $\theta = 10$ (b), $\theta = 15$ (c), $\theta = 20$ (d).	48

5.13. Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas y un ángulo de rotación $\theta = 35$ (a). Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales y un ángulo de rotación $\theta = 30$ (b). . . . 48

5.14. Se presenta la magnetización para una red de moiré hecha con redes cuadradas primera y segunda columna con ángulo de rotación $\theta = 5$ y $\theta = 35$ respectivamente. La tercera y cuarta columnas corresponden a una red de moiré hecha con redes hexagonales con ángulo de rotación $\theta = 5$ y $\theta = 30$ respectivamente. Las filas representan los diferentes tiempos, de arriba hacia abajo los tiempos son de 0τ , 84τ , 164τ , 244τ . . . 49

5.15. Magnetización en el lado derecho para redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 0$ 50

5.16. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 0\tau$ 51

5.17. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 140\tau$ 52

5.18. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 284\tau$ 52

5.19. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 0\tau$ 53

5.20. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 140\tau$ 53

5.21. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 284\tau$ 54

5.22. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 0\tau$ 54

5.23. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 124\tau$ 55

5.24. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 244\tau$ 55

5.25. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 0\tau$ 56

5.26. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 124\tau$ 56

5.27. Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 244\tau$ 57

Capítulo 1

Introducción

En 1907 Pierre Weiss encontró que los materiales ferromagnéticos tenían zonas donde los momentos magnéticos se orientaban de forma paralela, a dichas regiones del material se le denominó dominio magnético. Los dominios magnéticos y el control de estos se ha estudiado debido a las aplicaciones tecnológicas que tienen, como la fabricación de memorias magnéticas, o más recientemente el interés particular de usar el espín del electrón para procesar o transferir información en lugar de su carga. Esto último se está estudiando debido a la dificultad de seguir reduciendo el tamaño de los transistores en la tecnología CMOS (Semiconductor complementario de óxido metálico) [1] ya que dicho problema se traduce en que en un futuro no se podrá satisfacer las necesidades de potencia y velocidad de los procesadores.

El descubrimiento del efecto de magnetorresistencia gigante [2] donde se mostró, que la resistencia eléctrica de un dispositivo magnético se puede cambiar al modificar su textura magnética, entendiéndose por textura magnética la dirección en la que apuntan los momentos magnéticos del material, revolucionó la forma en que se almacenaban datos en la informática. Debido a que dicho efecto fue utilizado como base para desarrollar la construcción del cabezal de lectura del disco duro. Este hecho fue el que comenzó el campo de investigación de la magnetoelectrónica, conocida comúnmente como espintrónica. De manera general la espintrónica estudia el problema de cómo inyectar, manipular y detectar espines, ya que se puede usar el espín del electrón como un bit lógico, debido a que cuando un electrón está en presencia de un campo magnético el espín de este se polariza de dos maneras posibles paralelo o antiparalelo al campo lo cual se puede tomar como un valor de 1 o 0 respectivamente [3]. En este contexto los materiales que se están usando en gran medida son los que están compuestos por carbono como los nanotubos de carbono [4] o las películas de grafeno [5]. Aunque el grafeno no sea un material magnético originalmente, se puede inducir una respuesta magnética en el grafeno mediante la introducción de defectos [6, 7], esto hace que dicho material obtenga propiedades útiles para construir dispositivos en donde se pueda controlar el espín. Entre los estudios que se han realizado se encuentran: La formación de estados magnéticos localizados en grafeno, dicha formación se puede controlar mediante campos eléctricos externos [8], la creación de una magnetorresistencia negativa la cual fue hecha mediante la introducción de átomos de flúor en la red del grafeno [9] entre otros.

Dentro del campo de investigación de los materiales bidimensionales el grafeno ha ocupado un puesto preponderante, sin embargo, esto está cambiando debido a la aparición de nuevos cristales de espesor atómico o molecular [10, 11], que ha hecho que el estudio de los materiales bidimensionales tome un nuevo curso, ahora se ha empezado a estudiar las heteroestructuras de Van der Waals que son materiales hechos en laboratorio al apilar capas de cristales bidimensionales. Estos nuevos materiales ensamblados en laboratorios poseen características física novedosas, por lo cual están siendo estudiados en diferentes campos de la física como la superconductividad de alta temperatura [12], la fabricación de transistores [13], el estudio de magnetorresistencias [14] entre otros. Particularmente las propiedades magnéticas que presentan las heteroestructuras de Van der Waals son de gran interés debido a las aplicaciones tecnológicas que podrían llegar a tener, como el desarrollo de dispositivos útiles para la espintrónica. Al apilar materiales bidimensionales para fabricar las dichas heteroestructuras, se crean patrones de moiré [15] por la superposición de las dos redes cristalinas y en dependencia del patrón formado el material exhibirá algunas propiedades interesantes [16], debido a que los electrones ahora se mueven en una red de moiré creada por la superposición de las redes de los materiales bidimensionales con los que se fabricó la heteroestructura.

Por otro lado, se tienen los sistemas de la materia ultrafría, particularmente los condensados de Bose-Einstein, que desde hace casi dos décadas son conocidos como simuladores cuánticos de la materia [17]. La razón de dicha identificación es el paralelismo existente entre los condensados atrapados en redes periódicas de luz (o cristales de luz), y su contraparte en el estado sólido donde electrones que se mueven en redes cristalinas [18]. La versatilidad que los gases atómicos ultrafríos ofrecen para ser usados como sistemas análogos a los propios del estado sólido, se debe en gran medida a la posibilidad de controlar la dimensionalidad y campos externos en los que se desarrolla su dinámica. Incluso, es posible tener control sobre las interacciones entre pares de átomos, a través de la llamada resonancia de Feshbach [19]. Dentro del cuerpo de este trabajo se hará una síntesis breve de los principales logros en lo que respecta al confinamiento de gases atómicos ultrafríos, y particularmente condensados de Bose-Einstein, en las denominadas redes ópticas. También se dedicará un espacio para describir la forma en la que ocurren las interacciones entre pares de átomos y los potenciales modelo que los representan.

Se ha expuesto en los párrafos anteriores el interés actual en diseñar materiales bidimensionales en los que se busca explotar propiedades magnéticas con propósitos tecnológicos. Particularmente, uno de los objetivos que se persigue es la fabricación de heteroestructuras de Van der Waals a partir de apilar materiales bidimensionales con el fin de fabricar dispositivos útiles para la espintrónica. Por otro lado, y dada la posibilidad de recrear sistemas análogos usando como base el alto grado de control en gases atómicos ultrafríos confinados en redes ópticas de luz, el objetivo principal de este trabajo es proponer un protocolo en el que se estudian la dinámica de dominios magnéticos y su prevalencia como función del ángulo que define una red de moiré particular. Los dominios estarán constituidos de un condensado de Bose-Einstein en dos componentes hiperfinas, cuya red de confinamiento es precisamente una estructura de moiré. Dichos

patrones representa las heteroestructuras antes referidas. La investigación se centra en el estudio dinámico de un condensado de Bose bi-componente confinado en redes de moiré, variando en ángulo de rotación que define la red en cuestión. La forma en la que se abordará el estudio de la dinámica de dominios magnéticos o gas espinorial de Bose, es a través de una de las herramientas bien establecida para su descripción. Dicha herramienta es la ecuación de Gross-Pitaevskii que describe el estado base de un gas débilmente interactuante. Como aspectos técnicos relevantes, cabe mencionar que se abordará la descripción del gas de dos componentes tomado en cuenta la dimensionalidad del problema y el necesario escalamiento que sufren las constantes de acoplamiento de la interacción en dos dimensiones.

Esta tesis se organiza en 5 capítulos. En el capítulo 2 se presenta la descripción teórica de un condensado de Bose-Einstein con interacciones de corto y largo alcance. Inicialmente se deduce la forma de los potenciales modelo con los que se representa la interacción de corto y largo alcance. Los modelos son: un potencial de contacto dado por una delta de Dirac y un potencial resultado de la interacción entre dos momentos dipolares magnéticos. Posteriormente se hace la deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii teniendo en cuenta que se va a trabajar con un gas que es una mezcla de átomos en diferentes estados hiperfinos. Cabe aclarar que de forma práctica se considera solamente la interacción de contacto debido a que el momento magnético dipolar de los átomos con los que se va a trabajar es despreciable. Así se termina con un sistema de ecuaciones que describe al sistema.

En el capítulo 3 se hace una breve descripción de la forma en la que es posible atrapar átomos neutros en potenciales ópticos. Además se describe cómo se preparan en el laboratorio dichos potenciales, y en particular se presenta el potencial que se va a utilizar en este trabajo. A continuación, en el capítulo 4, se presentan los métodos numéricos que se utilizarán para resolver el sistema de ecuaciones que se encontró en el capítulo 2. Se inicia por ver cómo cambian las constantes de interacción del sistema debido a que se va a trabajar en dos dimensiones, posteriormente se hace la adimensionalización del sistema de ecuaciones y se presentan los valores numéricos de las constantes adimensionales. Además, se da a conocer los potenciales con los que se va a trabajar y los métodos numéricos para encontrar el estado estacionario del sistema y la evolución del mismo.

Por último en el capítulo 5 se presentan los resultados obtenidos de un estudio extenso a través de simulaciones computacionales, que consistió en considerar: diferentes valores de la frecuencia de la trampa armónica antes referida, dos tipos de redes con las que se formaron las redes de moiré (cuadrada y hexagonal) y diferentes valores de los ángulos de rotación que definen la red de moiré. Dichos resultados son que existen ángulos especiales para los cuales la magnetización se conserva. Estos ángulos son: 35 para las redes cuadradas y 30 para la hecha con redes hexagonales. Además, se dará una perspectiva de cómo se continuará este trabajo.

Capítulo 2

Condensado de Bose espinorial con interacciones: Descripción teórica

La descripción teórico-computacional de la dinámica de dominios magnéticos en redes de moiré, principal objetivo de esta tesis, tiene una estrecha relación con la dinámica propia de un condensado de Bose Einstein espinorial con interacciones, confinado en un potencial en dos dimensiones, cuya estructura es la de una red de moiré. La conexión entre ambos sistemas se basa en la analogía existente entre átomos ultrafríos confinados en redes ópticas, y electrones que se mueven en un sólido en la red definida por los átomos que lo constituyen. Por su naturaleza cuántica intrínseca y por el hecho de estar conformados por una cantidad de entidades de tamaño macroscópico, ambos sistemas se rigen por las mismas ecuaciones. Como es bien sabido, el estado base de un conjunto macroscópico de átomos bosónicos con interacción obedece la ecuación de Gross-Pitaevskii, la cual constituye una de las principales herramientas dentro del esquema de campo medio con las que abordamos la descripción de las propiedades físicas de átomos de Bose en su fase condensada.

De acuerdo a lo comentado en el párrafo anterior es conveniente establecer y justificar las ecuaciones específicas con las que se estudiará la dinámica de los dominios magnéticos. Ese es precisamente el objetivo del presente capítulo. Inicialmente se comienza haciendo una discusión general de las interacciones que se pueden tener en cuenta al estudiar el gas de Bose, dichas interacciones pueden ser de corto o largo alcance dependiendo de qué tan grande sea el momento magnético de los átomos. Para la interacción de corto alcance se procede haciendo una descripción de dispersión a bajas energía, mientras que para la de largo alcance se estudia la interacción entre dos dipolos magnéticos. Una vez encontrados los potenciales modelo que describen las interacciones se presenta una deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii la cual describe al condensado interactuante a temperatura cero. A continuación se presentará la generalización de la ecuación de Gross-Pitaevskii para el caso en el que el condensado está constituido de más de una componente. Como se describe en la introducción, la necesidad de considerar más de un estado hiperfino del condensado de Bose-Einstein obedece a que nuestro interés es describir la dinámica de dos dominios magnéticos.

El sistema a estudiar es un conjunto de N átomos con interacción en el estado base, este es un sistema que presenta propiedades cuánticas las cuales tienen una expresión macroscópica. La forma más general para describir este gas es comenzar con el Hamiltoniano del mismo. Para un sistema de N cuerpos es común estudiar dicho Hamiltoniano en el marco de la segunda cuantización el cual está dado por,

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l, \quad (2.1)$$

siendo $\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$ el Hamiltoniano de una partícula inmersa en un potencial externo $V_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$ y \hat{V} es el potencial de interacción entre partículas. Estamos considerando que esta interacción solo se da entre pares, debido a que el gas está altamente diluido. Los términos del Hamiltoniano 2.1 se pueden interpretar de la siguiente manera: el primero es la energía de los átomos inmersos en un potencial externo $V_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$. Como se describirá posteriormente, este potencial externo es el de una red de moiré. A este nivel solo es necesario enfatizar que se refiere a un término en la energía de un cuerpo. El segundo término se interpreta como dos partículas que están en los estados k, l y debido a la influencia del potencial \hat{V} se dispersan en dos partículas ahora en los estados i, j y la amplitud de probabilidad de que esto suceda está dada por $\langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle$. Para conocer esta amplitud necesitamos conocer el potencial modelo que representa la interacción \hat{V} . Como se discute en las siguientes secciones, el potencial modelo que representa la interacción debe tomar en cuenta la naturaleza de los átomos que participan en el proceso dinámico. A continuación, se hará un tratamiento para encontrar este potencial haciendo énfasis precisamente en el tipo de átomos que componen al condensado de Bose.

2.1. Potencial interacción

Si se quiere estudiar un gas de Bose cuyos átomos tienen un momento magnético importante entonces es necesario considerar las interacciones de largo alcance, mientras que, si el momento magnético de los átomos en cuestión no es relevante, el aspecto que se hace crucial es considerar la sintonización de las interacciones de contacto que puede llevarse a cabo a través de las conocidas resonancias de Feshbach. Aquí se presenta ambos casos. Para el potencial de contacto se trabajará analizando de manera general la dispersión de dos partículas a bajas energías en donde se llegará a la conclusión que el potencial es proporcional a una delta de Dirac, por otro lado, para el potencial de largo alcance se trabajará la interacción entre dos dipolos paralelos entre sí.

2.1.1. Interacción de contacto

Dado el hecho experimental que los gases atómicos ultrafríos se encuentran en el régimen altamente diluido, el objetivo de esta subsección es demostrar que el potencial efectivo que representa la interacción entre las partículas de este gas es un potencial de contacto, cuya amplitud es proporcional a la longitud de dispersión de onda s . Para

esto se hará un tratamiento general considerando que la interacción se puede tratar de un potencial con alcance finito.

Teniendo en cuenta que el condensado se encuentra a bajas temperaturas se puede hacer la suposición que sus átomos tienen bajas energías por lo cual para conocer el potencial de interacción a continuación haremos un tratamiento de dispersión considerando esta suposición. Para empezar, se tiene el Hamiltoniano de dos partículas interactuantes es,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|), \quad (2.2)$$

donde los dos primeros términos son la energía cinética de cada partícula y $V(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|)$ es la energía de interacción entre las dos átomos, aquí hacemos la suposición que esta solo depende de la separación entre las partículas. Este Hamiltoniano se puede separar si se pasa a coordenada centro de masa y coordenada relativa. El Hamiltoniano para la coordenada centro de masa describe una partícula libre, por lo cual el Hamiltoniano de interés es el de la coordenada relativa $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + V(r), \quad (2.3)$$

siendo μ la masa relativa. Con este Hamiltoniano se tiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \Psi(r) + V(r) \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (2.4)$$

donde se ha sustituido $\mu = \frac{m}{2}$ debido a que se esta trabajando con partículas idénticas. Si bien el interés de esta subsección es concentrarse en el potencial de contacto, se iniciará de manera general considerando que la interacción se puede tratar de un potencial con alcance finito b es decir si $r \gg b$ se tiene que $V(r) = 0$. Con esto en mente se pone convenientemente la dirección de la onda incidente en el eje z , así Ψ no dependerá de la coordenada φ , siendo esta el ángulo polar alrededor del eje z en esféricas. Ahora en la región donde el potencial tiende a cero lo único que se verá es la onda incidente más una onda dispersada,

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) &= e^{ikz} + \Psi_{dis}(r, \theta), \\ \Psi(r, \theta) &= e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

se puede escribir e^{ikz} como un desarrollo de polinomios de Legendre (P_l) (ver apéndice A.1), ya que en coordenadas esféricas $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$,

$$e^{ikz} = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\cos \theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos \theta). \quad (2.6)$$

Además, se propone $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} D_l P_l(\cos\theta)$, entonces función de onda se puede reescribir 2.5 como:

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) = & e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} \left[(-i)^l + \frac{D_r}{r} \right] P_l(\cos\theta) \\ & - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos\theta). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Por otro lado, manteniendo la condición de que la onda incidente tiene dirección z , la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el Hamiltoniano 2.3 en esféricas se puede expresar como:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta), \quad (2.8)$$

donde $R_l(r)$ debe satisfacer la ecuación,

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r), \quad (2.9)$$

en la región $r \gg b$ se tiene que $V(r) = 0$, entonces $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2}$ y la solución a esta ecuación está dada por:

$$R_{kl}(r) = \frac{\text{sen} \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)}{kr}, \quad (2.10)$$

siendo δ_l una fase, de esta manera $\Psi(r, \theta)$ sera:

$$\Psi(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (-i)^l e^{i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos\theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (i)^l e^{-i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos\theta), \quad (2.11)$$

igualando las ecuaciones 2.7 y 2.11 se llega a que,

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos\theta), \quad (2.12)$$

ahora analizando la expresión anterior para $f(\theta)$ se define $f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}$, recordando que se está analizando el caso a bajas energías, es decir $k \rightarrow 0$ entonces $f_l(k)$ es proporcional a k^{2l} [20], por lo tanto la contribución más importante es cuando $l = 0$. Debido a esto,

$$f(\theta) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \text{sen} \delta_0, \quad (2.13)$$

y la función de onda dispersada será:

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = \frac{\text{sen} \delta_0}{kr} e^{i(kr + \delta_0)}, \quad (2.14)$$

además, en el límite de bajas energías $k \rightarrow 0$, se define la longitud de dispersión de onda s , a como,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} = -a, \quad (2.15)$$

para continuar se toma el límite cuando $k \rightarrow 0$ entonces $|ka| \ll 1$, $\delta_0 \approx ka$ y $\sin \delta_0 \approx ka$, por lo cual, la ecuación 2.14 se puede reescribir como:

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = -\frac{a}{r} e^{ik(r+a)}. \quad (2.16)$$

Recordando que el objetivo inicial es encontrar una expresión para el potencial $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Se tomará la transformada de Fourier (TF) de la ecuación 2.4. Antes de hacerlo se recuerda la definición de la TF,

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \int_v d^3r e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \quad (2.17)$$

donde la transformada no es sobre un espacio infinito, pues la partícula esta confinada en una caja de volumen v , después de hará tender el volumen a infinito. Y la transformada inversa de Fourier,

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{f}(\mathbf{k}), \quad (2.18)$$

porque para este caso \mathbf{k} varia de forma discreta. Con esto en mente la TF de la ecuación 2.4 será (ver apéndice A.2),

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\Psi}(k') + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}(k'') = E \tilde{\Psi}(k'), \quad (2.19)$$

donde v es el volumen en el que está contenido el gas. La energía está dada por $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$ y por último se toma la TF de $\Psi(r, \theta)$ dada por la ecuación 2.5, obteniendo así la siguiente ecuación para $\Psi_{dis}(r, \theta)$,

$$\tilde{V}(k' - k'') + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}_{dis}(k'') = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \right] \tilde{\Psi}_{dis}(k'), \quad (2.20)$$

la solución de esta ecuación está dada en términos de la matriz de dispersión,

$$\tilde{\Psi}_{dis}(k') = \frac{1}{E_k - E_{k'} - i\delta} T(k', k; E_k), \quad (2.21)$$

donde δ es una cantidad positiva pequeña ($\delta \rightarrow 0^+$) que garantiza ondas dispersadas salientes. La ecuación para la matriz de dispersión está dada por:

$$T(k', k; E_k) = \tilde{V}(k' - k) + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \frac{1}{E_k - E_{k''} - i\delta} T(k'', k; E_k), \quad (2.22)$$

ahora se toma la transformada inversa de la función de onda 2.21 y se hace tender el volumen a infinito para convertir la suma sobre k a una integral de variable continua.,

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \frac{e^{ik'r}}{E_k - E_{k'} - i\delta} T(k', k; E_k), \quad (2.23)$$

como se está trabajando a bajas energías $E_k \rightarrow 0$ y $k \rightarrow 0$, entonces se puede hacer la siguiente aproximación $T(k', k; E_k) \approx T(0, 0, 0)$ obteniendo así una solución aproximada para la ecuación 2.4,

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2 r} T(0, 0, 0), \quad (2.24)$$

igualando las soluciones 2.24 y 2.16 se puede deducir que:

$$T(0, 0, 0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \quad (2.25)$$

desde la ecuación 2.22 para la matriz de dispersión se puede hacer la siguiente aproximación,

$$\begin{aligned} T(0, 0, 0) &\approx \tilde{V}(0), \\ \tilde{V}(0) &= \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

teniendo en cuenta la transformada inversa para $\tilde{V}(0)$ se concluye que,

$$V(r) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(r). \quad (2.27)$$

Esta última expresión es la de un potencial de contacto, es decir las partículas no se van a “ver” si no están en la misma posición es decir $r = 0$. Además, solo depende de la longitud de dispersión de onda s (a) la cual se puede modificar mediante técnicas experimentales [21, 22] debido a esto los experimentos con átomos ultrafríos son altamente controlables.

La descripción anterior corresponde a gases cuyos átomos no tienen un momento magnético dipolar importante, sin embargo, se conoce que en los laboratorios en los que se produce la condensación de bose se ha trabajado también con átomos de cromo, disprosio y erbio [23, 24, 25] los cuales están caracterizados precisamente por tener un momento magnético dipolar grande en ese caso las interacciones ya no se pueden considerar de contacto y se debe tomar en cuenta que el potencial modelo que las representa es un potencial de largo alcance. En la siguiente subsección se hace la descripción apropiada.

2.1.2. Potencial dipolar

En esta subsección se encontrará el potencial efectivo que representa la interacción de largo alcance entre átomos de Bose con momento dipolar grande. Cabe destacar que dado que la dinámica que interesa analizar en esta tesis se refiere a la que tiene lugar cuando dominios magnéticos ocupan regiones adyacentes del espacio, es crucial la

inclusión de dos o más especies en estados hiperfinos definidos. Cada especie de estos estados hiperfinos distribuida en una región limitada del espacio representa precisamente un dominio magnético. Más adelante se hará generalización de la ecuación escalar de GP para el caso espinorial.

Para determinar el potencial de interacción efectivo entre átomos con momento dipolar definido se iniciará considerando la versión clásica de la que se desprende el potencial magnético efectivo. El primer paso es calcular la energía de un momento dipolar magnético inmerso en un campo magnético. Para esto se recuerda que el campo magnético externo \mathbf{B} realiza un torque sobre el momento dipolar magnético \mathbf{m} dado por $\tau = mB \sin(\theta)$, siendo θ el ángulo entre los vectores \mathbf{m} y \mathbf{B} . Ahora el trabajo necesario para mover el momento dipolar desde un ángulo inicial θ_i hasta un ángulo final θ_f está dado por,

$$\begin{aligned} W &= - \int_{\theta_i}^{\theta_f} \tau d\theta \\ &= - \int_{\theta_i}^{\theta_f} mB \sin(\theta) d\theta \\ &= mB \cos(\theta_f) - mB \cos(\theta_i), \end{aligned} \quad (2.28)$$

recordando que el trabajo es igual al cambio en la energía $W = -\Delta U$ entonces se puede concluir que la energía de un momento dipolar magnético inmerso en un campo magnético externo está dada por,

$$U = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.29)$$

para el caso de interés el campo magnético es el generado por un momento dipolar, como es bien sabido el potencial vectorial en el punto \mathbf{r} producido por un momento dipolar ubicado en \mathbf{r}' está dado por [26],

$$\mathbf{A}_{dig}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{m} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}, \quad (2.30)$$

para encontrar el campo magnético encuentro el rotacional del potencial vectorial, en coordenadas esféricas se tiene que las componentes son: $B_r = \frac{2\mu_0 m}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \cos(\theta)$, $B_\theta = \frac{\mu_0 m}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \sin(\theta)$ y $B_\varphi = 0$. Entonces el campo magnético en forma vectorial será,

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 [3\mathbf{n}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) - \mathbf{m}]}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}, \quad (2.31)$$

donde $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$. Usando las ecuaciones 2.29 y 2.31 se puede escribir el potencial de interacción entre dos momentos dipolares \mathbf{m}_1 y \mathbf{m}_2 como ,

$$U = \frac{\mu_0 [\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{m}_1 - 3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{n})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{n})]}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \quad (2.32)$$

Para el presente proyecto se trabajará con partículas idénticas entonces la magnitud de los dipolos \mathbf{m}_1 y \mathbf{m}_2 son iguales, es decir $m_1 = m_2 = m$, además, sí los dipolos están orientados en dirección z el potencial de interacción es,

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\mu_0 m^2 (1 - 3 \cos^2(\theta))}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}, \quad (2.33)$$

siendo θ el ángulo entre el vector $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ y el eje z . Las expresiones 2.27 y 2.33 son respectivamente los potenciales de interacción de corto y largo alcance que se pueden considerar a la hora de estudiar un condensado de Bose interactuante confinado en un potencial externo. El punto de partida es la ecuación de Gross-Pitaevskii que describe la dinámica de un condensado con interacciones a temperatura $T = 0$, la cual será tratada a continuación.

2.2. Ecuación de Gross-Pitaevskii

En la sección anterior se dedujeron los potenciales que representan los dos tipos de interacción dados por las expresiones 2.27 y 2.33, ahora en esta sección se deducirá la ecuación que describe el condensado con interacciones a temperatura cero, llamada la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). Para iniciar se toma el Hamiltoniano en segunda cuantización 2.1 el cual se lo puede reescribir de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (2.34)$$

Siendo $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ y $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ los operadores de campo de creación y aniquilación respectivamente los cuales están se definen,

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_{k=0} \psi_k^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_k^\dagger, \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{k=0} \psi_k(\mathbf{r}, t) \hat{b}_k, \end{aligned} \quad (2.35)$$

respectivamente, donde $\psi_k(\mathbf{r}, t)$ es la autofunción del Hamiltoniano \hat{H}_0 . Estos operadores cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ [\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= 0, \\ [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)] &= 0, \end{aligned} \quad (2.36)$$

si se reemplaza las expresiones encontradas para los potenciales de interacción de corto y largo alcance el Hamiltoniano 2.34 se puede reescribir de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_c}{2} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_d}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (2.37)$$

siendo $g_c = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ y $g_d = \frac{p^2}{4\pi\epsilon_0}$. Con este Hamiltoniano se calcula la ecuación de Heisenberg para el operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}], \quad (2.38)$$

para hacer el conmutador se divide el Hamiltoniano en tres términos de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3, \\ \hat{H}_1 &= \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\ \hat{H}_2 &= \frac{g_c}{2} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\ \hat{H}_3 &= \frac{g_d}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (2.39)$$

entonces el conmutador en cuestión, se partirá en dos,

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1] + [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2] + [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_3], \quad (2.40)$$

a continuación, se calculará el primer conmutador,

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1] &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \hat{H}_1 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) - \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) - \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \end{aligned}$$

usando las relaciones de conmutación 2.36 se puede deducir que:

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.41)$$

se reemplaza esto en el segundo término,

$$\begin{aligned} &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) - \int d^3r' [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

entonces el primer conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] = \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2.42)$$

ahora se calculará el segundo conmutador,

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_2 - \hat{H}_2 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &\quad - \frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

a continuación, se trabajará sobre la segunda integral usando la relación 2.41,

$$\begin{aligned} &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &\quad + \frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &\quad + \frac{g_c}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \\ &\quad + \frac{g_c}{2} \int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) + \frac{g_c}{2} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{g_c}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) + g_c \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

entonces el segundo conmutador será,

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] = g_c \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2.43)$$

Por último, se trabaja sobre el tercer conmutador,

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_3 \right] &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_3 - \hat{H}_3 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

Ahora trabajando sobre el segundo término usando la relación 2.41,

$$\begin{aligned} &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \right] \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad + \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad + \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad + \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad + \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &= - \frac{g_d}{2} \int d^3 r' \int d^3 r'' \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}'', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}'', t) \\ &\quad + g_d \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

entonces el segundo conmutador es,

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_3 \right] = g_d \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (2.44)$$

con los resultados 2.42, 2.43 y 2.44, la ecuación de Heisenberg 2.38 será:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g_c \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + g_d \int d^3 r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (2.45)$$

Como se quiere describir un condensado a temperatura cero, se debe tener en cuenta que todas las partículas ocupan el estado base, por lo cual los operadores de campo 2.35 se pueden aproximar por el primer término de la sumatoria, además, en el límite termodinámico los operadores de creación y aniquilación se pueden remplazar por \sqrt{N} obteniendo así la siguiente ecuación,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g_c N |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 + g_d N \int d^3 r' \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi_0(\mathbf{r}', t)|^2 \right] \psi_0(\mathbf{r}, t), \quad (2.46)$$

esta última expresión es la ecuación de Gross-Pitaevskii la cual describe un condensado a temperatura cero con interacciones de corto y largo alcance¹.

La ecuación G-P arriba deducida es la que satisface el estado base de un gas de Bose débilmente interactuante. Vale la pena destacar que dicha ecuación posee la característica de ser muy general. Esto significa que se trata de una ecuación que obedece la función de onda $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ (2.46) en la que el potencial de confinamiento, identificado como $\hat{V}_{ext}(\hat{r})$, puede ser de cualquier tipo, desde los campos externos en los que típicamente se consiguen los condensados de Bose-Einstein, es decir potenciales de tipo armónico, hasta las llamadas redes ópticas de las que se hablará más adelante. Además, otro aspecto general de la ecuación de G-P es que si bien por su construcción, particularmente en lo que respecta al potencial de interacción interatómico, es de naturaleza tridimensional, en el próximo capítulo se verá que es posible tratar con sistemas en dos dimensiones, y por ende, la dinámica y estado estacionario del condensado corresponderán a un sistema bidimensional.

Aunado a lo señalado en el párrafo anterior ahora se hace la siguiente acotación. Hasta ahora se ha hecho una descripción general de un condensado con interacciones de corto y largo alcance mediante la ecuación de Gross-Pitaevskii. Para el presente trabajo se estudiarán átomos lo cuales su momento dipolar magnético es despreciable, por lo cual tan solo se tendrá en cuenta la interacción de contacto, además de se considerará

¹Para resolver esta ecuación de forma numérica se debe definir en cuantas dimensiones hacerlo, definir un grid para discretizar el espacio y definir un paso temporal. Al hacerlo en dos dimensiones, el grid que habitualmente se utiliza es de 512 por 512, es decir, se tiene un espacio bidimensional discretizado por 262144 puntos. La complicación numérica a la hora de resolver la ecuación es el cálculo de la integral $\int d^3 r' \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi_0(\mathbf{r}', t)|^2$ dado que se está integrando sobre \mathbf{r}' esta es una función de \mathbf{r} es decir se debe resolver una integral por cada punto del grid lo cual no es viable hablando en tiempos de computo.

el hecho de que dichas partículas tienen espín diferente de cero, en particular se trabajará con átomos con espín total 1. El sistema a estudiar es una mezcla de átomos en dos estados hiperfinos por lo cual se debe considerar que el potencial de contacto se debe modificar. En la siguiente sección se hará el respectivo tratamiento al potencial de interacción.

2.3. Ecuación de Gross-Pitaevskii con varias componentes

Dado que ahora se considerará el espín, en el Hamiltoniano en segunda cuantización 2.1 el contador i así como j , k y l representa el conjunto de números cuánticos que describen el estado de una partícula, por lo cual deben contener al espín. Sin embargo, para este tratamiento se escribirá explícitamente el número cuántico de espín, entonces el Hamiltoniano en segunda cuantización será,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \hat{b}_{i,\alpha}^\dagger \langle i\alpha | \hat{H}_0 | j\beta \rangle \hat{b}_{j,\beta} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_{i,\alpha}^\dagger \hat{b}_{j,\beta}^\dagger \langle i\alpha, j\beta | V | k\gamma, l\sigma \rangle \hat{b}_{k,\gamma} \hat{b}_{l,\sigma}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

siendo α , β , γ y σ los números cuánticos de espín. Este Hamiltoniano se puede escribir en términos de operadores de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int dr \int dr' \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t), \end{aligned} \quad (2.48)$$

donde $\hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ y $\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t)$ son los operadores de campo de creación y aniquilación de una partícula con espín α respectivamente los cuales se definen como:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger, \\ \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

siendo $\phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}, t)$ los auto estados de \hat{H}_0 . Estos operadores tienen las siguientes relaciones de conmutación,

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha,\beta}, \\ [\hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= 0, \\ [\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}', t)] &= 0. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Para trabajar el término de interacción hay que tener en cuenta el espín de las partículas. Si se tienen dos partículas con espín total $F_1 = 1$, $F_2 = 1$, de la teoría de momento angular se tiene que $\mathcal{F} = F_1 + F_2$, entonces se puede estudiar el sistema en cualquiera de las dos bases $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle$ o $|F_1, m_1\rangle \otimes |F_2, m_2\rangle = |F_1, m_1; F_2, m_2\rangle$, puesto que son equivalentes, debido a que $F_1 = F_2 = F = 1$ se simplificará la notación de esta última base de la siguiente manera $|F_1, m_1; F_2, m_2\rangle = |m_1; m_2\rangle$. Teniendo en cuenta que $\mathcal{F} = 0, 1, 2$ se tendrá los estados $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle = |2, 2\rangle, |2, 1\rangle, |2, 0\rangle, |2, -1\rangle, |2, -2\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$ los cuales están dados en términos de la base $|m_1; m_2\rangle$ con los coeficientes de Clebsch Gordan,

$$\begin{aligned}
 |2, 2\rangle &= |1; 1\rangle, \\
 |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle + |0; 1\rangle), \\
 |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|1; -1\rangle + 2|0; 0\rangle + |-1; 1\rangle), \\
 |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\
 |2, -2\rangle &= |-1-1\rangle, \\
 |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle - |0; 1\rangle), \\
 |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; -1\rangle - |-1; 1\rangle), \\
 |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\
 |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|1; -1\rangle - |0; 0\rangle + |-1; 1\rangle).
 \end{aligned} \tag{2.51}$$

Como se puede ver los estados $|1, m_{\mathcal{F}}\rangle$ son anti simétricos por lo cual estos estados serán desechados porque estos corresponden a fermiones. Ahora usando la aproximación del potencial a bajas energías el término de interacción del Hamiltoniano 2.48 se puede escribir como,

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} g_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \tag{2.52}$$

siendo $g_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma}}{m}$. Lo cual es equivalente a:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0, 2}^{2\mathcal{F}} g_{\mathcal{F}} \sum_{m_{\mathcal{F}}=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \int d^3r \sum_{\alpha, \beta=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \\
 \sum_{\gamma, \sigma=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \gamma; \sigma \rangle \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t),
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

siendo $g_{\mathcal{F}} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\mathcal{F}}}{m}$, es decir, se pasa de considerar las dos partículas como individuales a considerarlas como sistema de dos partículas con espín total $\mathcal{F} = 0, 2$. Donde los operadores de creación y aniquilación de pares de partículas con espín total \mathcal{F} y proyección

$m_{\mathcal{F}}$ son:

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}^{\dagger}(\mathbf{r},t) &= \sum_{\alpha,\beta=-F}^F \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r},t), \\ \hat{\Psi}_{\mathcal{F},m_{\mathcal{F}}}(\mathbf{r},t) &= \sum_{\alpha,\beta=-F}^F \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \alpha; \beta \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r},t),\end{aligned}\tag{2.54}$$

la expresión anterior se puede reescribir de una forma más simplificada como:

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\tag{2.55}$$

donde $\hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} = \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \gamma; \sigma \rangle$ es el elemento de matriz del proyector $\hat{P}_{\mathcal{F}}$ en la base $|F_1, m_1; F_2, m_2\rangle$, además, al sumar sobre \mathcal{F} no se toma el 1 por ser antisimétrico. Entonces si se considera el espín total de los átomos el Hamiltoniano que describe al sistema es,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r},t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\end{aligned}\tag{2.56}$$

ahora se procede a calcular la ecuación de Heisenberg, para esto de nuevo se dividirá el Hamiltoniano 2.56 en dos términos $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$,

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r},t), \\ \hat{H}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r},t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r},t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\end{aligned}\tag{2.57}$$

entonces la ecuación para el operador $\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r},t)$ será:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r},t), \hat{H}_1 \right] + \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r},t), \hat{H}_2 \right].\tag{2.58}$$

A continuación, se calculará el primer conmutador,

$$\begin{aligned}
 \left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] &= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \hat{H}_1 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \\
 &= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \sum_\alpha \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \\
 &\quad - \sum_\alpha \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \\
 &= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \sum_\alpha \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \\
 &\quad - \sum_\alpha \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t),
 \end{aligned}$$

de las relaciones de conmutación 2.50 se tiene que,

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) = \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha, \nu}, \quad (2.59)$$

se reemplaza esto en el segundo término,

$$\begin{aligned}
 &= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \sum_\alpha \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \\
 &\quad - \sum_\alpha \int d^3 r' \left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha, \nu} \right] \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \\
 &= \sum_\alpha \int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha, \nu} \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}', t) \\
 &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t),
 \end{aligned}$$

entonces el primer conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] = \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t). \quad (2.60)$$

ahora se trabaja sobre el segundo conmutador,

$$\begin{aligned}
 \left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}', t) \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t),
 \end{aligned}$$

trabajando sobre el segundo término usando la relación 2.59

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\beta,\nu} \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha,\nu} \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\beta,\nu} \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}', t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\nu,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t),
\end{aligned}$$

en el penúltimo término β es un índice mudo por lo cual se lo puede llamar α y debido a que $\hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} = \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\nu,\alpha,\gamma,\sigma}$ se puede sumar los dos últimos términos. Entonces se obtiene,

$$\left[\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] = \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \quad (2.61)$$

ahora es necesario conocer el elemento de matriz $\hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma}$. Para esto se debe conocer forma del proyector $\hat{P}_{\mathcal{F}}$ en la base $|F_1, m_1; F_2, m_2\rangle$. Lo cual se puede hacer usando las

siguientes relaciones.

$$\begin{aligned} \sum_{\mathcal{F}} \hat{P}_{\mathcal{F}} &= \mathbb{I}_{\mathcal{F}} = \mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2, \\ \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 &= \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{F_1+F_2} \frac{1}{2} [\mathcal{F}(\mathcal{F}+1) - F_1(F_1+1) - F_2(F_2+1)] \hat{P}_{\mathcal{F}}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

recordando que $F_1 = F_2 = 1$ solo se tienen los siguientes proyectores:

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 &= \frac{1}{3} (\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 - \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2), \\ \hat{P}_2 &= \frac{1}{3} (2\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2), \end{aligned} \quad (2.63)$$

con esta representación de los proyectores se puede calcular su elemento de matriz,

$$\begin{aligned} \hat{P}_0^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= \delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} - \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle, \\ \hat{P}_2^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= 2\delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} + \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle, \end{aligned} \quad (2.64)$$

reemplazando esto en la ecuación 2.61 se obtiene,

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2] &= \sum_{\alpha} \frac{g_0 + 2g_2}{3} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \frac{g_2 - g_0}{3} \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.65)$$

usando las expresiones 2.60, y 2.65 se tiene que la ecuación de Heisenberg para el operador de campo $\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t)$ será:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Nuevamente se hace la aproximación de que a $T = 0$ el operador de campo es $\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \approx \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\nu}$. Entonces la ecuación para el estado base,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \hat{b}_{0,\nu} &= \hat{H}_0 \phi_{0,\nu} \hat{b}_{0,\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} N \sum_{\alpha} \phi_{0,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^{\dagger} \phi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha} \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\nu} \\ &+ \frac{g_2 - g_0}{3} N \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \phi_{0,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^{\dagger} \phi_{0,\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\gamma} \cdot \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle \phi_{0,\sigma}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\sigma}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Ahora se define una función de onda espinorial como $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha} \psi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) |\alpha\rangle$, con el fin de que esta esté normalizada a la unidad, se la define $\psi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t)$ de la siguiente manera:

$$\psi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{n_{\alpha}}{N}} \phi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t), \quad (2.68)$$

donde N es el número total de partículas y n_{α} es el número de partículas en el estado de espín α , con esta definición y teniendo en cuenta, que en el límite termodinámico los operadores $\hat{b}_{0,\alpha} \approx \sqrt{n_{\alpha}}$, $\hat{b}_{0,\alpha}^{\dagger} \approx \sqrt{n_{\alpha}}$ la ecuación 2.67 se reescribe como:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} N \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_2 - g_0}{3} N \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.69)$$

teniendo en cuenta que N es una constante, esta puede ser absorbida por las g_2 y g_0 definiendo las nuevas como $g_2 = \frac{4\pi\hbar^2 N a_2}{m}$ y $g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 N a_0}{m}$. Usando la notación para los elementos de matriz $\langle \alpha | \mathbf{F}_1 | \gamma \rangle = \mathbf{F}_1^{\alpha\gamma}$, $\langle \nu | \mathbf{F}_2 | \sigma \rangle = \mathbf{F}_2^{\nu\sigma}$ y reemplazando \hat{H}_0 por $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$ en la representación de las coordenadas se puede reescribir la ecuación de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}_1^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}_2^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.70)$$

Esta última expresión representa un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, se tendrá una ecuación por cada componente de espín, para el presente estudio se considera un condensado con dos componentes de espín con valores $+1$ y -1 . Dicho sistema de ecuaciones describe un condensado de Bose-Einstein espinorial que interactúa mediante un potencial de contacto. Por último, se definen las constantes $c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}$ y $c_2 = \frac{g_2 - g_0}{3}$ haciendo énfasis en que del signo de esta última depende el comportamiento del sistema, si $c_2 < 0$ tendrá un comportamiento ferromagnético y si $c_2 > 0$ un comportamiento polar según la referencia [27].

Capítulo 3

Gas de Bose confinado en redes de moiré

En este capítulo se describe la forma en la que es posible, además de crear estructuras de moiré, confinar gases atómicos ultrafíos de Bose en las mismas. Este tipo de configuraciones propuestas en el presente trabajo, y particularmente la investigación de la dinámica de dominios magnéticos, representa una meta asequible en el actual contexto experimental. Primero se describirá de forma breve el mecanismo de confinamiento de átomos neutros y posteriormente la forma en la que se pueden construir redes de moiré a partir de las redes ópticas tradicionales.

3.1. Átomos neutros confinados en potenciales ópticos

El efecto neto de un campo de luz láser que incide en átomos neutros es la capacidad de confinarlos. Cuando un átomo está sujeto a un campo eléctrico \mathbf{E} éste induce un momento dipolar eléctrico \mathbf{P} proporcional al campo eléctrico de la forma,

$$\mathbf{P} = \alpha \mathbf{E}, \quad (3.1)$$

donde α es la polarizabilidad, la cual depende de la frecuencia ω del láser. La energía de interacción de el momento dipolar inducido \mathbf{P} por el campo eléctrico \mathbf{E} está dada por

$$U_{dip} = - \left\langle \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}}{2} \right\rangle, \quad (3.2)$$

dado que el campo eléctrico y el momento dipolar oscilan en el tiempo a una frecuencia ω , como es usual se toma el promedio temporal sobre los campos, el cual es representado por los paréntesis angulares, ello conduce a la expresión para la energía potencial de confinamiento,

$$U_{dip} = - \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I, \quad (3.3)$$

esto es, la energía potencial de un átomo en un campo eléctrico generado por un haz láser es proporcional a la intensidad del campo $I = 2\epsilon_0 c |\mathbf{E}|^2$, y a la parte real de la

polarizabilidad. Dado que la energía U_{dip} es conservativa, es posible expresarla a través de la derivada de una fuerza. Esta fuerza conocida como dipolar óptica es de la forma

$$F_{dip}(r) = -\nabla U_{dip}(r) = \frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) \nabla I(r), \quad (3.4)$$

esta fuerza es la responsable del mecanismo de confinamiento de los átomos neutros, y es proporcional al gradiente de la intensidad del campo eléctrico. Por sus características este tipo de confinamiento es llamado trampa dipolar óptica. Para determinar la polarizabilidad α , se emplea un modelo de oscilador armónico amortiguado clásico, llamado modelo de Lorentz [28], cuyo resultado para la polarizabilidad es

$$\alpha(\omega) = 6\pi\epsilon_0 c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\frac{\omega^3}{\omega_0^2})\Gamma}, \quad (3.5)$$

donde ω_0 es la frecuencia de oscilación correspondiente a una transición óptica, en otras palabras, corresponde a una frecuencia de resonancia en el modelo del oscilador. Por otra parte Γ corresponde al amortiguamiento de dicho oscilador.

Una aproximación más apropiada para calcular la polarizabilidad atómica es a través de un modelo semiclásico. En este caso el átomo es tratado como un sistema cuántico de dos niveles que interactúa con un campo de radiación clásico. El amortiguamiento Γ es determinado por los elementos de matriz dipolares del estado base $|b\rangle$ y el estado excitado $|e\rangle$ de un átomo de dos niveles,

$$\Gamma = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0 c^3 \hbar} |\langle e| P |b\rangle|^2, \quad (3.6)$$

con $P = -er$, que representa el operador dipolar. Las expresiones anteriores nos permiten determinar el potencial dipolar en función de la frecuencia, cuya forma es [28]

$$U_{dip} = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(r). \quad (3.7)$$

Esta expresión es válida para cualquier frecuencia del láser ω . Cuando $\omega = \omega_0$ es considerada una resonancia, cuando $\omega = -\omega_0$ esto es llamado término contrarotante resonante. En la mayoría de los experimentos la frecuencia del láser es relativamente cercana a la frecuencia de resonancia ω_0 , tal que se define la desintonía (detuning) que es $\Delta = \omega - \omega_0$ se satisface que $\Delta \ll \omega_0$. En este caso el término contrarotante puede ser despreciado, y esta aproximación es conocida como onda rotante dando lugar al potencial dipolar que sería de la forma,

$$U_{dip} = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(r). \quad (3.8)$$

Para que ocurra el atrapamiento dipolar, es crucial el signo de la desintonía pues éste determina cuándo el potencial dipolar óptico es atractivo. La desintonía al rojo es cuando $\Delta < 0$, el potencial dipolar es negativo y la interacción atrae a los átomos en el campo de luz láser. Los átomos son atrapados en las posiciones con los máximos de

intensidad. La desintonía al azul es cuando $\Delta > 0$ la interacción dipolar repele a los átomos fuera del campo, y el mínimo del potencial corresponde al mínimo de intensidad.

Como información complementaria, se aprovecharán estas líneas para resaltar que en experimentos típicos, el isótopo de ^{87}Rb ha sido el más usado, de entre los átomos alcalinos, con el propósito de estudiar los efectos estacionarios y dinámicos de su confinamiento por potenciales creados con luz. La estructura fina de este átomo, i.e. el acoplamiento de espín-órbita, posee un doblete de la línea D, esto es, $^2S_{1/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$ con frecuencias de transición de 795nm y 780nm respectivamente. Su espín nuclear, $I = 3/2$, da lugar al desdoblamiento hiperfino del estado base cerca de 6.8GHz y desdoblado los estados excitados al orden de cientos de MHz. Típicamente el ancho del haz láser con perfil de intensidad gaussiana es del orden de $210\ \mu\text{m}$ y usualmente la longitud de onda en la región infraroja es de $\lambda = 800\text{nm}$. Más adelante se retomará esta discusión relacionada con los parámetros experimentales.

3.2. Redes ópticas

Posterior al logro de la condensación de Bose-Einstein en 1995, una gran cantidad de resultados emanados de los gases atómicos ultrafríos han surgido de la capacidad de confinarlos en las llamadas redes ópticas. Como se ha mencionado previamente, la conexión entre los condensados de Bose confinados en potenciales ópticos y los electrones en un sólido es que ambos son sistemas de muchos cuerpos en un estado degenerado [18]. Dado que en la naturaleza los electrones en un sólido están sumergidos en potenciales cristalinos, esto los imposibilita de ser manipulados eléctricamente. Tanto los iones de la red como los mismos electrones, limitan en cierta manera el poder manipular experimentalmente las redes cristalinas a través de campos eléctricos externos. En contraparte, la realización experimental de un gas de átomos neutros en estado degenerado, como los condensados de Bose, tal es el caso de ^{87}Rb y ^{11}Na , han dado pauta a que estos sistemas sean excelentes emuladores de la materia condensada y el estado sólido, ya que su naturaleza neutra y su comportamiento cuántico permite que sean considerados como los análogos de electrones moviéndose en un potencial particular. A continuación se explicará cómo se forman estas redes ópticas.

Un potencial de red periódica puede ser creado en una trampa dipolar óptica contraponiendo un par de haces láser uno con respecto del otro, con la misma longitud de onda λ . Como resultado estos haces interfieren y forman una onda estacionaria la cual da como resultado un potencial periódico en el que se atrapan a los átomos, esto es, una red óptica es una simple onda estacionaria de luz linealmente polarizada. Es posible formar este tipo de potenciales periódicos en 1, 2 y 3 dimensiones, todo depende del número de haces láser y cómo se colocan de manera espacial, más adelante se explicará la geometría espacial para generar diferentes ondas estacionarias con formas específicas, esto es, geometrías en dos dimensiones como las que se estudian en la presente tesis, cuadrada, triangular, honeycomb y más recientemente geometrías quasicristalinas.

La red más simple de formar es en una dimensión y corresponde a una onda estacionaria en forma de “tubo”. En ese caso, los átomos sólo pueden moverse a lo largo del eje del potencial, esto es una dimensión. Esta red periódica puede ser creada por ejemplo por un par de láseres gaussianos de tal manera que se forma un patrón de interferencia de onda estacionaria en 1D. Como resultado se genera un potencial periódico de atrapamiento dado por [29]

$$V(r, z) = -V_0 \exp\left(-2\frac{r^2}{\omega_0^2}\right) \cos^2(kz) \approx -V_0\left(1 - \frac{2r^2}{\omega_0^2}\right) \cos^2(kz), \quad (3.9)$$

donde ω_0 denota la frecuencia del haz láser, $k = 2\pi/\lambda$ es el valor absoluto del vector de onda del haz láser, y V_0 denota la profundidad de la red óptica.

Una ventaja importante de usar campos ópticos para crear potenciales periódicos y atrapar átomos es que la geometría y la profundidad V_0 del potencial están bajo el control completo del experimental. Un ejemplo de un potencial resultante en 2 dimensiones es de la forma

$$V(x, y) = -V_0(\cos^2(kx) + \cos^2(ky) + 2\vec{e}_x\vec{e}_y \cos(\phi) \cos(kx) \cos(ky)), \quad (3.10)$$

donde k es la magnitud del vector de onda del láser, \vec{e}_i es el vector polarización en dirección i , y ϕ es una fase temporal entre la interferencia de los campos de los láseres. Análogamente, la superposición de tres haces láser con la misma longitud de onda λ en las direcciones x , y y z forma una red periódica en 3 dimensiones (ver figura 3.1), donde el potencial es de la forma

$$V(x, y, z) = -V_0(\cos^2(kx) + \cos^2(ky) + \cos^2(kz)). \quad (3.11)$$

Un aspecto importante en la formación de redes ópticas en cualquier dimensión, es el cuantificar su profundidad, esto es conocer la magnitud de V_0 . Dicho conocimiento proporciona información de si el gas de Bose se encuentra en una fase de superfluido (SF) o Aislante de Mott (MI). Para esto es útil definir la energía de recoil E_r . La energía de recoil o de retroceso, es el cambio en la energía cinética de un átomo asociado con la emisión o absorción de un fotón con momento k . Este átomo se encuentra confinado en la red óptica la cual es generada por un láser cuya longitud de onda es λ , entonces, la energía de recoil es,

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2. \quad (3.12)$$

Algunos valores experimentales típicos para la energía de recoil en el caso del ^{87}Rb y una constante de red $a = 425\text{nm}$ son, $E_r = 8.42 \times 10^{-30}\text{J} = 525 \times 10^{-9}\text{eV} = 12.7\text{kHz}$. La profundidad de una red V_0 dada en unidades de energía de recoil, para garantizar que el gas se encuentra en su fase superfluida, oscila entre $V_0 = 6E_r$ y $V_0 = 12E_r$.

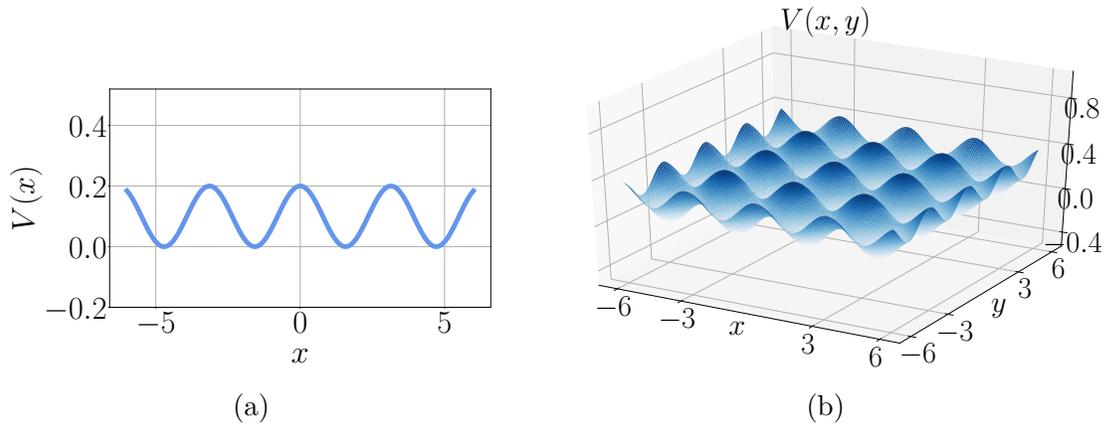


Figura 3.1: Se presenta la red óptica en una y dos dimensiones, (a) y (b) respectivamente.

3.3. Redes de moiré

En este punto es pertinente recordar que el tipo de redes que son de interés en el presente estudio son las redes de moiré. Como se ha establecido previamente, en este trabajo se analizará la dinámica de un condensado de Bose confinado en este tipo de estructuras. Dichas estructuras resultan de la superposición de dos redes periódicas giradas una respecto de la otra en un ángulo θ . En las siguientes líneas describimos la forma en la que es posible generar este tipo de redes mediante la combinación de haces de luz láser dispuestos apropiadamente. Cabe resaltar que debido al hecho que experimentalmente se tiene la presencia de un potencial de confinamiento armónico, tomaremos en cuenta la presencia del mismo para el estudio de la dinámica del gas espinorial. Se estudiarán dos casos, donde las redes de moiré serán creadas a partir de redes cuadradas y redes hexagonales, dichas redes están dadas por las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned}
 V_{cu}(x, y) &= V_0 [\cos^2(kx) + \cos^2(ky)], \\
 V_{hex}(x, y) &= V_0 \left[\cos\left(\frac{4ky}{3}\right) + \cos\left(\frac{2kx}{\sqrt{3}} - \frac{2ky}{3}\right) + \cos\left(\frac{2kx}{\sqrt{3}} + \frac{2ky}{3}\right) \right],
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

respectivamente, siendo V_0 la profundidad del potencial y $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ donde λ es la longitud de onda del láser con el que se genera la red. Por otro lado, el potencial para la trampa armónica está dado por la siguiente expresión

$$V_{HO}(x, y) = \frac{1}{2}m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2), \tag{3.14}$$

siendo m la masa de la partícula y ω_i la frecuencia de la trampa en el eje i (con $i = x, y$). Entonces de manera explícita el potencial externo está dado por

$$V(x, y) = \begin{cases} V_{HO}(x, y) + \frac{1}{2} [V_{cu}(x, y) + V_{cu}(x', y')] \\ V_{HO}(x, y) + \frac{1}{2} [V_{hex}(x, y) + V_{hex}(x', y')] \end{cases} \tag{3.15}$$

siendo x', y' un sistema de referencia rotado en un ángulo θ respecto al sistema de coordenadas x, y , estos dos sistemas de referencia se relacionan mediante la matriz de rotación en dos dimensiones de la siguiente manera,

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Capítulo 4

Ecuación de Gross-Pitaevskii: Tratamiento numérico

Hasta ahora se hizo la deducción exhaustiva de la ecuación GP de manera general, sin tener en cuenta la dimensionalidad del problema, el número de componentes que van a conformar el condensado, el potencial en el que va a estar confinado el gas o el tipo de átomos con los que se va a trabajar. En este capítulo se trabajará en un gas en particular formado por átomos de ^{87}Rb en dos estados hiperfinos con proyecciones de espín $+1$ y -1 , el cual estará confinado en una red óptica bidimensional. Además, se estudiarán los métodos numéricos necesarios para resolver la ecuación GP.

4.1. Dimensionalidad

La ocurrencia de algunos fenómenos físicos está directamente relacionada con la dimensionalidad en la que se está estudiando al sistema, en el presente estudio se usa un condensado en dos dimensiones para estudiar la dinámica de dominios magnéticos. Los condensados de Bose-Einstein en el laboratorio son atrapados en potenciales armónicos tridimensionales de la forma: $\frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$ siendo ω_i la frecuencia de la trampa en el eje i (con $i = x, y, z$). Se pueden obtener condensados cuasi 1D o cuasi 2D al modificar las frecuencias de la trampa. Para obtener un condensado 1D se hacen dos de estas frecuencias mucho más grandes que la tercera de esta manera la forma de la trampa es la de un cilindro delgado, es decir, si hacemos $\omega_x = \omega_y \gg \omega_z$ el condensado queda confinado en el eje z . Por otro lado, se puede obtener un condensado 2D si se hace una de las frecuencias mucho mayor a las otras dos de tal manera que el condensado se convierte en un disco, es decir, si se hace $\omega_z \gg \omega_x = \omega_y$ el condensado queda confinado en el plano x, y . Como consecuencia de restringir el movimiento de las partículas en una o dos direcciones se tiene que la interacción interatómica se modifica, de tal manera que se debe reescalar la constante de interacción para trabajar con una ecuación unidimensional o bidimensional [30]. A continuación, se trabajará como se deben reescalar las constantes de interacción para del caso bidimensional.

Para encontrar como se debe reescalar la constante de interacción se parte de la

ecuación de Gross-Pitaevskii,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{3D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_{03D} + g_{3D} |\psi_{3D}(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \psi_{3D}(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

donde $g_{3D} = \frac{4\pi\hbar^2 aN}{m}$. Dado que la frecuencia en z es muy grande lo que se obtiene es que la trampa se vuelve muy profunda en dicha dirección, por lo cual la función de onda tridimensional se la puede escribir como la multiplicación de una función que depende de x, y con otra que solo depende de z de la siguiente manera,

$$\psi_{3D}(\mathbf{r}, t) = \psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}^{HO}(z), \quad (4.2)$$

siendo $\phi_{1D}^{HO}(z)$ la función de onda del estado base del oscilador armónico, es decir, $\phi_{1D}^{HO}(z) = \left(\frac{1}{\pi l_z^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{z^2}{2l_z^2}}$ donde $l_z^2 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}}$. En los cálculos consiguientes se quitará la dependencia de las funciones $\psi_{2D}(x, y, t)$ y $\phi_{1D}^{HO}(z)$ con el fin de tener un poco más de orden. Reemplazando la función de onda propuesta 4.2 en la ecuación 5.4 se tiene,

$$\begin{aligned} \phi_{1D}^{HO} i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}}{\partial t} &= \frac{\phi_{1D}^{HO}}{2m} (P_x^2 + P_y^2) \psi_{2D} + \psi_{2D} \frac{P_z^2}{2m} \phi_{1D}^{HO} + \frac{1}{2} m (\omega_z^2 z^2) \psi_{2D} \phi_{1D}^{HO} \\ &+ \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \psi_{2D} \phi_{1D}^{HO} + g_{3D} |\psi_{2D}|^2 |\phi_{1D}^{HO}|^2 \psi_{2D} \phi_{1D}^{HO}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde se ha utilizado $\hat{H}_{03D} = \frac{(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)}{2m} + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$. Si se divide la anterior ecuación por la función de onda tridimensional 4.2, se puede reescribir dicha ecuación como,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}}{\partial t} = \left[\frac{(P_x^2 + P_y^2)}{2m} + \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) + M(x, y) \right] \psi_{2D}, \quad (4.4)$$

donde se ha definido,

$$M(x, y) = \frac{1}{\phi_{1D}^{HO}} \frac{P_z^2}{2m} \phi_{1D}^{HO} + \frac{1}{\phi_{1D}^{HO}} \frac{1}{2} m (\omega_z^2 z^2) \phi_{1D}^{HO} + g_{3D} \frac{1}{\phi_{1D}^{HO}} |\psi_{2D}|^2 |\phi_{1D}^{HO}|^2 \phi_{1D}^{HO}, \quad (4.5)$$

es decir, $M(x, y)$ cumple la siguiente ecuación,

$$M(x, y) \phi_{1D}^{HO} = \left[\frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m (\omega_z^2 z^2) + g_{3D} |\psi_{2D}|^2 |\phi_{1D}^{HO}|^2 \right] \phi_{1D}^{HO}, \quad (4.6)$$

a continuación, se hace actuar el operador $\frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m (\omega_z^2 z^2)$ sobre ϕ_{1D}^{HO} y se procede a integrar la ecuación en z ,

$$\begin{aligned} M(x, y) \int dz \phi_{1D}^{HO} &= \frac{\hbar\omega_z}{2} \int dz \phi_{1D}^{HO} + g_{3D} |\psi_{2D}|^2 \int dz \phi_{1D}^{HO3} \\ M(x, y) \left(\frac{1}{\pi l_z^2}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2\pi l_z^2} &= \frac{\hbar\omega_z}{2} \left(\frac{1}{\pi l_z^2}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{2\pi l_z^2} + g_{3D} |\psi_{2D}|^2 \left(\frac{1}{\pi l_z^2}\right)^{\frac{3}{4}} \sqrt{2\pi l_z^2} \\ M(x, y) &= \frac{\hbar\omega_z}{2} + \frac{g_{3D}}{\sqrt{3\pi} l_z} |\psi_{2D}|^2, \end{aligned}$$

entonces la ecuación bidimensional de Gross-Pitaevskii es,

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}}{\partial t} = \left[\frac{(P_x^2 + P_y^2)}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) + \frac{g_{3D}}{\sqrt{3\pi}l_z} |\psi_{2D}|^2 \right] \psi_{2D}, \quad (4.7)$$

donde no se ha escrito el termino $\frac{\hbar\omega_z}{2}$ debido a que es una constante y lo único que hará es un corrimiento en la energía. Entonces de esta última expresión se puede concluir que la constante de interacción en dos dimensiones se relaciona con la constante en tres dimensiones de la siguiente manera,

$$g_{2D} = \frac{g_{3D}}{\sqrt{3\pi}l_z} \quad (4.8)$$

4.2. Adimensionalización de la ecuación de Gross-Pitaevskii

Como ya se mencionó un condensado de Bose-Einstein conformado átomos en diferentes estados hiperfinos, se describe mediante un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, dicho sistema de ecuaciones no tienen solución analítica, por lo cual en este capítulo se presentarán los métodos numéricos que se usarán para resolverlo. El primer paso a seguir es adimensionalizar la ecuación (2.70) con el fin de minimizar al máximo el número de parámetros libres.

Para adimensionalizar dicha ecuación se deben definir unidades de energía: ε , tiempo: τ , y longitud: l_0 , con estas definen nuevas variables adimensionales de tiempo y posición $\tilde{t} = \frac{t}{\tau}$, $\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{l_0}$ de tiempo y posición respectivamente y por ultimo una función de onda adimensional $\tilde{\psi}_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = l_0 \psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$, que se define de esta manera para que se cumpla la condición de normalización. Ahora se procede a calcular como transforman las derivadas debido a estas definiciones,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{1}{l_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Ahora reemplazando estas definiciones en la ecuación (2.70) se obtiene,

$$\begin{aligned} i\frac{\hbar}{\tau} \frac{\partial \tilde{\psi}_\nu(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} l_0^{-2} \tilde{\nabla}^2 + V_{ext}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right] \tilde{\psi}_\nu(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \\ &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} l_0^{-2} \sum_{\alpha} \tilde{\psi}_\alpha^*(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \tilde{\psi}_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \tilde{\psi}_\nu(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \\ &+ \frac{g_2 - g_0}{3} l_0^{-2} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}_1^{\alpha\gamma} \tilde{\psi}_\alpha^*(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \tilde{\psi}_\gamma \cdot (\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \mathbf{F}_2^{\nu\sigma} \tilde{\psi}_\sigma(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \end{aligned} \quad (4.10)$$

a pesar que se está trabajando con variables y función de onda adimensionales, la ecuación sigue teniendo unidades de energía, por lo cual se procede a dividir la ecuación

entre ε y se definen los siguientes parámetros con el fin de simplificar al máximo la ecuación,

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \frac{\hbar}{\varepsilon\tau} \\ \gamma_1 &= \frac{\hbar^2}{\varepsilon l_0^2 m} \\ \mathbf{v}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) &= \frac{V_{ext}(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon} \\ \mathbf{g}_i &= \frac{g_{2Di}}{\varepsilon l_0^3} = \frac{4\pi\hbar^2 N a_i}{\sqrt{3\pi} l_z \varepsilon l_0^2 m}; \quad i = 0, 2,\end{aligned}\tag{4.11}$$

donde ya se ha utilizado el hecho que se está trabajando en dos dimensiones, al usar la ecuación 4.8 para la constante de interacción. Con estos parámetros la ecuación 2.70 adimensionalizada será:

$$\begin{aligned}i\gamma_0 \frac{\partial \psi_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \left[-\frac{1}{2} \gamma_1 \nabla^2 + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{\mathbf{g}_0 + 2\mathbf{g}_2}{3} \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{\mathbf{g}_2 - \mathbf{g}_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}_1^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}_2^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\tag{4.12}$$

en esta última ecuación se ha omitido el colocar tildes a las variables y a la función de onda, teniendo en cuenta que ya son adimensionales, de ahora en adelante se trabajará con las variables sin tildes sobreentendiendo que ya no tienen dimensiones.

Recordando que esta ecuación representa un sistema de dos ecuaciones, debido a que solo se va a trabajar con dos estados hiperfinos con proyecciones de espín +1 y -1, es decir, la suma no tiene en cuenta el termino cero. Se trabajará en los dos últimos términos para ponerlos de manera explícita. Desarrollando la suma del segundo término se tiene,

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) = (|\psi_1|^2 + |\psi_{-1}|^2) (\psi_1 \delta_{\nu,1} + \psi_{-1} \delta_{\nu,-1}).\tag{4.13}$$

Por otro lado, para el tercer término se necesita recordar la matriz de espín $\mathbf{F} = \hat{F}_x \hat{i} + \hat{F}_y \hat{j} + \hat{F}_z \hat{k}$ (siendo $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ vectores unitarios en la dirección de x, y, z) cuyas componentes están dadas por:

$$\hat{F}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},\tag{4.14}$$

las cuales no llevan \hbar por el hecho que se está trabajando sin unidades. Desarrollando el ultimo termino se tiene,

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}_1^{\alpha\gamma} \tilde{\psi}_{\alpha}^*(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \tilde{\psi}_{\gamma}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \cdot (\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \mathbf{F}_2^{\nu\sigma} \tilde{\psi}_{\sigma}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) &= \left[0\hat{i} + 0\hat{j} + (|\psi_1|^2 - |\psi_{-1}|^2) \hat{k} \right] \cdot \\ &\left[0\hat{i} + 0\hat{j} + (\psi_1 \delta_{\nu,1} - \psi_{-1} \delta_{\nu,-1}) \hat{k} \right]\end{aligned}\tag{4.15}$$

reemplazando 4.13 y 4.15 en 4.12 se obtiene después de simplificar las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 i\gamma_0 \frac{\partial \psi_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \left[-\frac{1}{2}\gamma_1 \nabla^2 + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}, t) \\
 & + \delta_{\nu,1} \psi_1(\mathbf{r}, t) [\mathbf{g}_2 |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + \mathbf{g}_3 |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2] \\
 & + \delta_{\nu,-1} \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) [\mathbf{g}_2 |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2 + \mathbf{g}_3 |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2],
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

donde $\mathbf{g}_3 = \frac{2\mathbf{g}_0 + \mathbf{g}_2}{3}$. Este es el sistema de ecuaciones que se pretende resolver, a continuación, se presentará el valor numérico de las constantes que se definieron en esta sección.

4.3. Constantes

Para calcular el valor de las constantes que intervienen en la ecuación 4.16, es necesario definir el valor de las unidades de energía, tiempo y longitud que se definieron al inicio de la anterior sección. Debido a que el potencial externo en el que se trabajará son redes ópticas, se usarán las unidades naturales de estos potenciales [29] para definir dichas unidades,

$$\varepsilon = E_r, \quad l_0 = \frac{\lambda}{2}, \quad \tau = \frac{\hbar}{E_r} \tag{4.17}$$

siendo E_r la energía de recoil dada por $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ con m la masa de la partícula y $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, donde λ es la misma con la que se define la unidad de longitud l_0 y es la longitud de onda del láser que se utiliza para generar la trampa óptica. La equivalencia de τ es con el fin de que $\gamma_0 = 1$. A continuación, se procederá a calcular los valores de los parámetros que se van a usar en las respectivas unidades dadas por las ecuaciones (4.19), para lo cual se utilizaran valores que se reportan de experimentos [31], donde se reporta que la longitud de onda del láser con el que se crea la red óptica es $\lambda = 1064\text{nm}$, por otro lado el valor de la masa m y longitudes de dispersión a_i se obtienen de la referencia [32] y por último los valores de las frecuencias de la trampa armónica se reportan en las referencias [33, 34]. A continuación se presentan los valores de los parámetros necesarios para hacer los cálculos de las constantes.

$$\begin{aligned}
 N &= 3 \times 10^2, \\
 \lambda &= 1064\text{nm}, \\
 m &= 86.909u, \\
 a_0 &= 101.8a_B, \\
 a_2 &= 100.4a_B, \\
 \omega_x &= 2\pi \times 50 \frac{\text{rad}}{\text{s}}, \\
 \omega_y &= 2\pi \times 50 \frac{\text{rad}}{\text{s}}, \\
 \omega_z &= 2\pi \times 5000 \frac{\text{rad}}{\text{s}},
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

donde $u = 1.660538921(73) \times 10^{-24} \text{g}$ y $a_B = 5.2917721092(17) \times 10^{-9} \text{cm}$. Entonces las unidades de energía (ε) y longitud (l_0) serán:

$$E_r = 1.34367 \times 10^{-30} J, \quad l_0 = 5.32 \times 10^{-7} m, \quad \tau = 7.84842 \times 10^{-5} s \quad (4.19)$$

con esto las constantes de la ecuación 4.16 se presentan en la siguiente tabla:

Constante	γ_0	γ_1	\mathbf{g}_2	\mathbf{g}_3
Valor	1	0.202642	10.6168523	10.715548

Cuadro 4.1: Constantes de la ecuación adimensional.

El estudio hecho en esta investigación se realizó garantizando que las dos componentes del condensado sean miscibles para poder observar la dinámica de los dominios magnéticos, es decir, que la constante de interacción \mathbf{g}_3 que mide cómo interactúan componentes en diferente estado hiperfino sea menor que la constante de interacción \mathbf{g}_2 que mide cómo interactúan componentes en el mismo estado hiperfino, específicamente el valor tomado es $\mathbf{g}_3 = 0.8\mathbf{g}_2$. Por último, respecto a la adimensionalización del potencial externo, las redes cuadradas y hexagonales 3.13 con las que se crearán las redes de moiré tendrán una profundidad $V_0 = 10E_r$, por lo cual dichas redes adimensionales serán,

$$\begin{aligned} v_{cu}(x, y) &= 10 [\cos^2(\pi x) + \cos^2(\pi y)], \\ v_{hex}(x, y) &= 10 \left[\cos\left(\frac{4\pi y}{3}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3}} - \frac{2\pi y}{3}\right) + \cos\left(\frac{2\pi x}{\sqrt{3}} + \frac{2\pi y}{3}\right) \right], \end{aligned} \quad (4.20)$$

mientras que el potencial de trampa armónica escrito en su forma adimensional será,

$$v_{HO}(x, y) = \gamma_x x^2 + \gamma_y y^2. \quad (4.21)$$

donde $\gamma_x = \frac{m\omega_x^2 l_0^2}{2E_r} = 0.0015$ y $\gamma_y = \frac{m\omega_y^2 l_0^2}{2E_r} = 0.0015$. Hasta ahora se ha hecho la adimensionalización de la ecuación que describe el condensado y se ha presentado el valor numérico de todas las constantes. A continuación, se presentan los métodos numéricos que se usaran para resolver dicha ecuación.

4.4. Evolución en tiempo imaginario

Para encontrar el estado estacionario del sistema se utiliza el método de evolución en tiempo imaginario [35, 36], el cual es un método iterativo que dada una semilla, la evoluciona hasta llegar al estado con más baja energía del sistema. A continuación, se ilustra el funcionamiento del método.

Debido a que el Hamiltoniano es un operador hermítico, las auto-energías de este son números reales. Además, si se tiene un potencial apropiado se puede tener que dichas

auto-energías son positivas. Dado un Hamiltoniano con estas características se tiene la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.22)$$

dada una condición inicial a $t = 0$ para la función de onda $\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_i(\mathbf{r})$, la solución a un tiempo t esta dada por el operador de evolución temporal de la siguiente manera,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \psi_i(\mathbf{r}). \quad (4.23)$$

Por otro lado, las auto-funciones del Hamiltoniano ($\phi_k(\mathbf{r})$) conforman una base, por lo tanto se puede expresar la condición inicial para la función de onda como una combinación lineal de dichas auto-funciones, $\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_k C_k \phi_k(\mathbf{r})$. Reemplazando esto en la ecuación (4.23) la solución se la puede escribir como:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} C_k \phi_k(\mathbf{r}), \quad (4.24)$$

donde E_k es la energía asociada a la auto función $\phi_k(\mathbf{r})$. Ahora se hace un cambio de variable en la coordenada temporal es decir hacer $t = -i\tau$ con $\tau \in \mathbb{R}$ se obtendrá

$$\psi(\mathbf{r}, -i\tau) = \sum_k e^{-\frac{E_k \tau}{\hbar}} C_k \phi_k(\mathbf{r}). \quad (4.25)$$

De esta última ecuación se puede observar que para un τ lo suficientemente grande, el término que predomina de la sumatoria es el de menor energía debido a la exponencial, por lo cual se puede aproximar la solución como,

$$\psi(\mathbf{r}, -i\tau) \approx e^{-\frac{E_0 \tau}{\hbar}} C_0 \phi_0(\mathbf{r}), \quad (4.26)$$

siendo E_0 la menor energía del sistema, a esta evolución en τ se le llama evolución en tiempo imaginario. Cabe resaltar que la convergencia de este método depende de la separación entre los valores propios de las energías del hamiltoniano. Además, si se tiene en cuenta que el Hamiltoniano en cuestión tiene auto-estados degenerados, el estado al que se llega es una combinación lineal de estos, por lo cual, con este método se encontraran estados estacionarios del sistema que no necesariamente son el estado base del mismo. El hecho de hacer $t = -i\tau$ hace que la ecuación de Schrödinger se modifique y tome la siguiente forma,

$$-\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.27)$$

Por lo cual la única forma de aplicar este método no solo es usando el operador de evolución temporal, sino que también se lo puede usar en conjunto con métodos para solucionar ecuaciones diferenciales. Entre ellos es que se ha escogido para trabajar la evolución es el método de Runge-Kutta de cuarto orden a continuación se hará una pequeña descripción de su aplicación.

4.5. Runge-Kutta de cuarto orden

Una deducción del método se puede encontrar en la referencia [37], este es un método iterativo para resolver ecuaciones diferenciales de la forma [38]

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x, t), \quad (4.28)$$

dada una condición inicial $x(t = 0) = a$ ó sistemas de N ecuaciones diferenciales de la forma,

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} = f_2(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial x_N}{\partial t} = f_N(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \end{cases} \quad (4.29)$$

dadas las respectivas condiciones iniciales $x_i(t = 0) = a_i$ con $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Para este trabajo se necesita resolver el sistema de ecuaciones diferenciales dado por la ecuación (4.16) haciendo $t = -i\tau$. Es decir, el sistema de 2 ecuaciones que se quiere resolver es de la forma,

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = f(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t) \\ \frac{\partial \psi_{-1}}{\partial t} = h(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t) \end{cases} \quad (4.30)$$

dadas las condiciones iniciales al tiempo t , $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ y $\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)$ las funciones solución después de un tiempo Δt^1 están dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \psi_1(\mathbf{r}, t) + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ \psi_{-1}(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) + \frac{\Delta t}{6} (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4), \end{aligned} \quad (4.31)$$

donde las constantes k_i están dadas por:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(\psi_1(\mathbf{r}, t), \psi_{-1}(\mathbf{r}, t), t), \\ k_2 &= f\left(\psi_1(\mathbf{r}, t) + \frac{k_1 \Delta t}{2}, \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) + \frac{m_1 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_3 &= f\left(\psi_1(\mathbf{r}, t) + \frac{k_2 \Delta t}{2}, \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) + \frac{m_2 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_4 &= f(\psi_1(\mathbf{r}, t) + k_3 \Delta t, \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) + m_3 \Delta t, t + \Delta t), \end{aligned} \quad (4.32)$$

de manera similar para las constantes m_i la función $h(\psi_1, \psi_{-1}, t)$.

¹ Δt es conocido como tamaño de paso, para este trabajo se tomo $\Delta t = 0.002\tau$

Capítulo 5

Dinámica de la textura de espín en redes de moiré.

En este capítulo se presentan los resultados de la investigación en torno a la evolución de dominios magnéticos, y la persistencia de la textura de espín del condensado de Bose-Einstein espinorial confinado en redes de moiré. Aunque se mencionará más adelante, conviene señalar que la textura de espín contiene toda la información del campo vectorial definido por las direcciones de los espines que yacen en el plano definido por las redes en dos dimensiones. Como se ha descrito previamente, se utilizaron redes de moiré generadas mediante la superposición de dos redes periódicas, rotadas en un ángulo θ una respecto de la otra. En particular las geometrías que se consideraron para la construcción de las redes de moiré fueron la cuadrada y la hexagonal. Vale la pena resaltar que dado que el presente trabajo constituye también la propuesta de un protocolo para ser realizado en los laboratorios de átomos ultrafríos, además de considerar las redes de moiré también se tomó en cuenta la presencia de un potencial de trampa armónica. Como es bien sabido, dicho potencial siempre está presente en los experimentos. Los ángulos de rotación que se consideraron para definir las redes de moiré fueron, $\theta = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60$. Además, también se analizó la influencia del potencial armónico para diferentes valores de las frecuencias $\omega_x = \omega_y$. En particular se trabajó para $\gamma_x = \gamma_y = \tilde{\gamma}$ en la ecuación 4.21. Los valores que se usaron fueron $\tilde{\gamma} = 0\gamma_x, 0.4\gamma_x, 0.7\gamma_x, 1\gamma_x$, siendo $\gamma_x = 0.0015$. Cabe resaltar que este valor puede ser modificado al modificar la frecuencia de la trampa armónica con la que se confinan a los átomos, por su definición a mayor frecuencia mayor será el valor de $\tilde{\gamma}$.

La organización de este capítulo es como sigue a continuación. Primero se presentan las observables físicas que se analizarán y el estado inicial, el cual a su vez establece el protocolo mencionado en el párrafo anterior. Posteriormente se presentan los resultados de la evolución que se basan en la credibilidad que el cálculo numérico tiene, la llamada fidelidad. Los principales resultados obtenidos para las observables se presentan conjuntamente para las redes cuadrada y hexagonal, especificando los valores que toma la frecuencia de confinamiento.

5.1. Observables

En esta sección se describirán las cantidades dinámicas a estudiar para caracterizar de forma cuantitativa y cualitativa la evolución de los dominios magnéticos, y particularmente su persistencia a medida que se desarrolla la evolución para redes definidas por un ángulo dado θ . La primera observable que se considera para estudiar la persistencia de los dominios magnéticos es la magnetización. La magnetización izquierda $m_I(t)$ y derecha $m_D(t)$, están definidas en términos de la magnetización local $m(x, y, t) = \rho_1(x, y, t) - \rho_{-1}(x, y, t)$, siendo $\rho_1(x, y, t)$ y $\rho_{-1}(x, y, t)$ las densidades asociadas con las componentes $\psi_1(x, y, t)$ y $\psi_{-1}(x, y, t)$, respectivamente. Por lo tanto, las magnetizaciones en los lados izquierdo y derecho se definen de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} m_I(t) &= \int \int_{\Omega_I} dx dy m(x, y, t), \\ m_D(t) &= \int \int_{\Omega_D} dx dy m(x, y, t), \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde Ω_I y Ω_D se refiere al área de las mitades izquierda y derecha del sistema, respectivamente.

La segunda observable a ser analizada es la textura de espín $\mathbf{T}(x, y, t)$, la cual es una función vectorial que indica la dirección en la que apuntan los espines del sistema a cada instante de tiempo. Esta observable se define de la siguiente manera,

$$\mathbf{T}(x, y, t) = \Psi^\dagger(x, y, t) \mathbf{F} \Psi(x, y, t), \tag{5.2}$$

siendo $\mathbf{F} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ donde las σ_i son las matrices de Pauli y $\Psi(x, y, t) = (\psi_1(x, y, t), \psi_{-1}(x, y, t))$. Entonces la textura de espín está dada por,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(x, y, t) &= [\psi_1^* \psi_{-1} + \psi_1 \psi_{-1}^*] \hat{x} \\ &\quad + i [\psi_1^* \psi_{-1} - \psi_1 \psi_{-1}^*] \hat{y} \\ &\quad + [|\psi_1|^2 - |\psi_{-1}|^2] \hat{z}. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Debemos hacer notar que la textura de espín, por como está definida, es una cantidad real por lo que, a través de un análisis cualitativo, será posible confirmar la información proporcionada por la magnetización en relación a la conservación del estado inicial, para valores dados del ángulo θ que define la red de moiré en cuestión.

Ciertamente, y como puede apreciarse de la ecuación (5.3), la componente de la textura de espín en la dirección \hat{z} coincide con la magnetización. Es precisamente este hecho lo que permitirá establecer cuantitativamente, o confirmar, la persistencia del estado inicial. Además, vale la pena resaltar que la magnetización es de forma natural una cantidad más fácil de ser medida a través de distintos dispositivos, ya sea en sistemas ultrafríos o bien en sistemas pertenecientes a la materia condensada.

Como se describirá a continuación, inicialmente el condensado yace en un espacio bidimensional y el estado inicial corresponde a un dominio magnético constituido de dos zonas, una con espines apuntando en dirección $+\hat{z}$ y la otra en dirección $-\hat{z}$. Con el fin

de estudiar la dinámica de los dominios magnéticos se hicieron diferentes simulaciones numéricas. A continuación, se hace una breve descripción de en qué consistió cada simulación y los resultados obtenidos.

5.2. Preparación de los estados iniciales

El primer paso para seguir la evolución temporal de los dominios magnéticos es preparar el estado inicial a partir del cual inicia la dinámica. A continuación, se presenta una breve descripción del procedimiento seguido para preparar dicho estado.

En primer lugar se determina los estados estacionarios resolviendo numéricamente las ecuaciones 2.70 mediante el método de evolución en tiempo imaginario presentado en el capítulo previo. El potencial externo está dado por la ecuación 3.15, es decir, incluye tanto la red de geometría definida, como el potencial inhomogéneo asociado a la trampa armónica. El estado estacionario que se alcanza corresponde a uno tal que las densidades de las dos componentes de espín \uparrow y \downarrow tienen una distribución uniforme en toda la red. En cada sitio se tiene, una Gaussiana centrada en el mismo, cuya amplitud varía dependiendo de la distancia al centro. En la figura 5.1 se muestran los estados estacionarios para las redes de moiré provenientes de la superposición de dos redes cuadradas, y un ángulo de 30° . Desde luego si dicho estado es puesto a evolucionar, este permanecerá invariante. Posteriormente se elimina de forma manual las partículas cuya proyección de espín sea -1 de la mitad derecha y las partículas con proyección de espín -1 de la mitad izquierda. Dado que este nuevo estado no satisface las ecuaciones acopladas de Gross-Pitaevskii para ambas componentes, necesariamente tendrá una evolución hacia un nuevo estado. En la figura 5.2 se puede apreciar el estado preparado a partir del cual evolucionarán los dos dominios. Cabe mencionar que la eliminación de partículas imita a los protocolos experimentales en los que se utiliza un dispositivo de espejo digital para eliminar ópticamente los átomos en posiciones específicas [39].

Este procedimiento fue realizado para cada caso de potencial externo, ya que se tomaron dos tipos de redes cuadradas y hexagonales, diferentes ángulos de rotación θ y diferentes trampas armónicas caracterizadas por $\tilde{\gamma}$. En la figura 5.3 se muestran las magnetizaciones al tiempo cero para diferentes redes de moiré usando una trampa armónica de $\tilde{\gamma} = \gamma_x$. En cada recuadro se especifica si las redes usadas son cuadradas (C) o hexagonales (H) y el respectivo valor del ángulo de rotación.

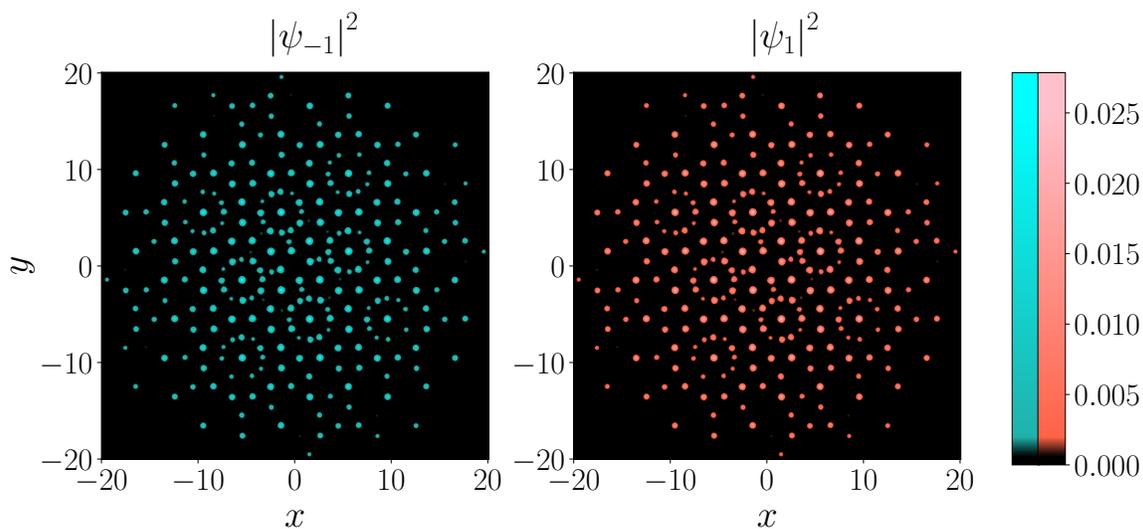


Figura 5.1: Estado estacionario para una red de moiré creada con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 30$ y con trampa $\tilde{\gamma} = 0.7\gamma_x$.

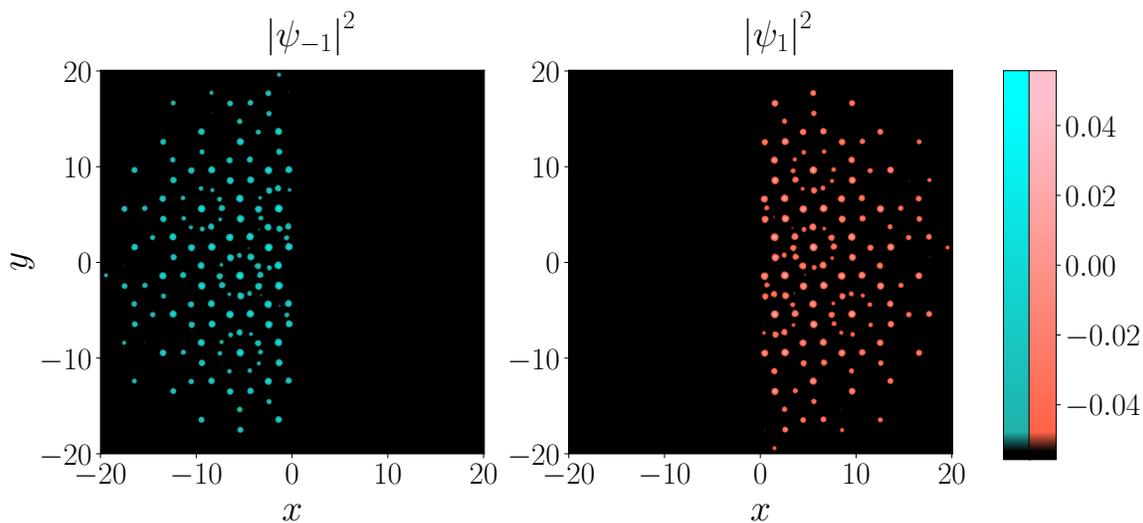


Figura 5.2: Estado inicial para una red de moiré creada con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 30$ y con trampa $\tilde{\gamma} = 0.7\gamma_x$.

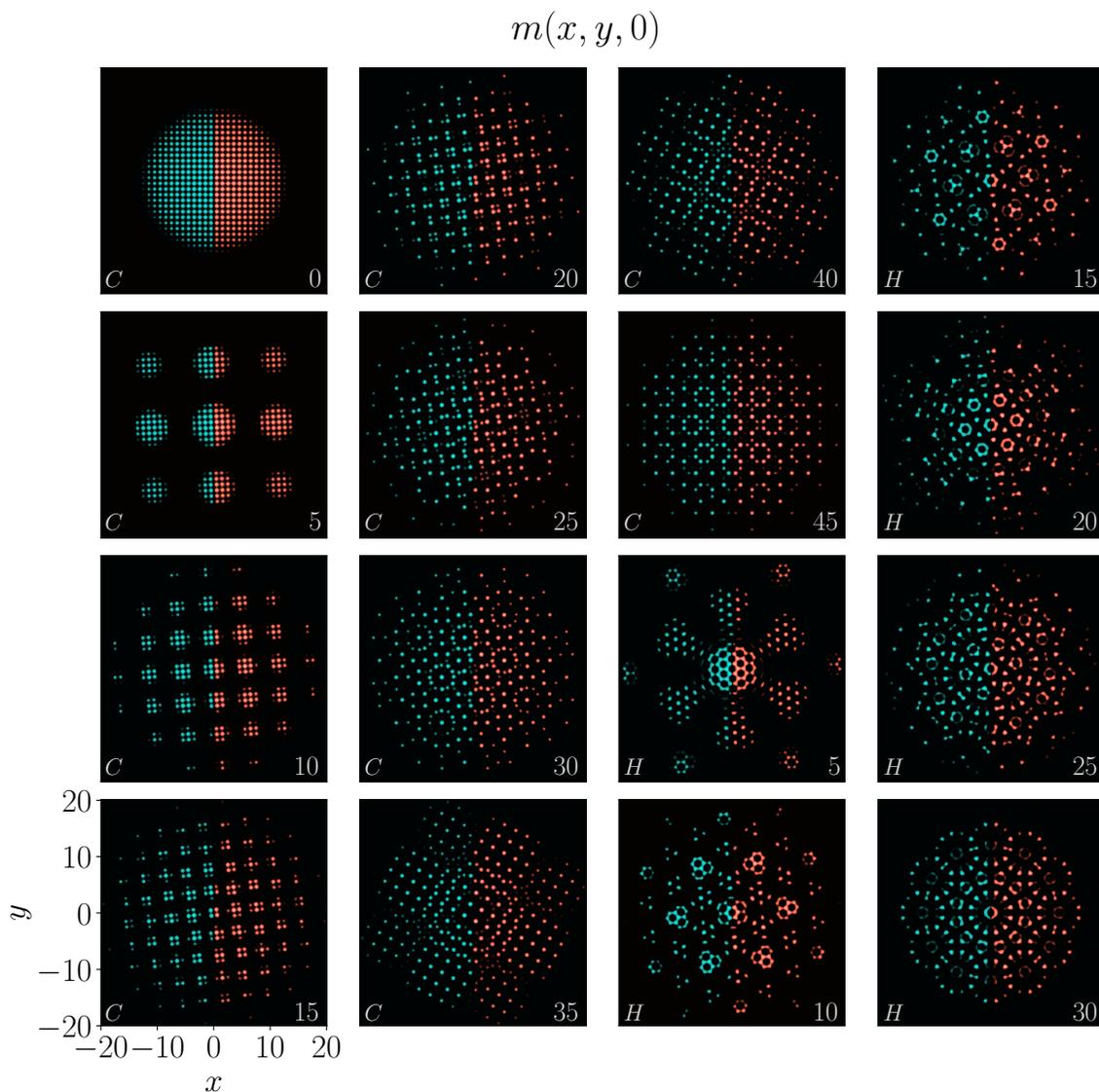


Figura 5.3: Se presenta la magnetización para diferentes redes de moiré a $t = 0$. Cada recuadro tiene dos indicativos, la letra en la esquina inferior izquierda hace referencia si la red de moiré está hecha con redes cuadradas (C) o hexagonales (H). Mientras que el numero en la esquina inferior derecha hace referencia al valor del ángulo de rotación entre las redes.

Antes de comenzar con la evolución de los estados, se debe verificar que los cálculos numéricos son confiables, dado que todo calculo numérico tendrá un error al solucionar una ecuación. Dicho error debe al algoritmo que se está utilizando y a la precisión de la máquina. A continuación, se presenta un análisis que da credibilidad a los cálculos realizados y por ende a los resultados obtenidos.

5.3. Fidelidad

Con el fin de evaluar la confiabilidad del programa que se usa para resolver las ecuaciones acopladas para las componentes del espín, se introduce una cantidad llamada la fidelidad. Para calcular dicha cantidad a un tiempo dado, se evoluciona el estado inicial hasta dicho tiempo y después se cambia el código para que evolucione hacia atrás, es decir, se cambia t por $-t$ en las ecuaciones que describen la dinámica del sistema. Y se comprara el estado inicial con el estado producto de haberlo llevado hasta un tiempo y después haberlo regresado, para compararlo se usa el producto interno, es decir la fidelidad se define de la siguiente manera,

$$F(t) = \int dx \int dy [\psi_{1i}^*(x, y, 0)\psi_{1e}(x, y, t) + \psi_{-1i}^*(x, y, 0)\psi_{-1e}(x, y, t)], \quad (5.4)$$

Siendo $\psi_{1i}(x, y, 0)$ y $\psi_{-1i}(x, y, 0)$ el estado inicial ($t = 0$) y $\psi_{1e}(x, y, t)$ y $\psi_{-1e}(x, y, t)$ el resultado de evolucionar el estado inicial hasta un tiempo t y después regresarlo hasta $t = 0$. Esta cantidad mide que tan parecidos son el estado inicial con el estado que se evolucionó y regresó. Por su definición el valor máximo que puede tomar $F(t)$ es 1, mientras que el valor que toma la fidelidad sea cercano a 1 se puede decir que los cálculos numéricos son confiables y por lo tanto los errores numéricos son pequeños. Cabe resaltar que los errores en el cálculo dependen del tamaño del paso temporal que se toma en la evolución y del tamaño de discretización del grid, es decir, de cuantos puntos se toman para discretizar un intervalo de espacio. Por ende, que la fidelidad se logre mantener para mayores tiempos de evolución, depende del paso temporal y de la discretización espacial. Debido a esto también se estudió la fidelidad para diferentes valores de paso temporal y de discretización espacial cabe resaltar que al hacer más pequeños estos dos valores el tiempo de cómputo para evolucionar el sistema a un tiempo se aumenta bastante. Además, se llega a un punto que sin importar que tan pequeña sea la discretización, la fidelidad decae para un tiempo y esto se puede atribuir a la precisión de la máquina. Por lo cual el número de puntos en el grid y el paso temporal que se escogieron fueron 512 y 0.002 respectivamente. A continuación, se presenta el análisis hecho para los valores escogidos. Primero se calculó la fidelidad para tiempos de evolución grandes, con el fin de observar hasta qué punto de la dinámica el cálculo numérico resulta confiable.

Antes de hacer la descripción asociada a la dinámica, es importante mencionar que todos los tiempos especificados de aquí en adelante estarán en unidades de tiempo τ definido como $\tau = \hbar/E_r$. En la figura 5.4 se puede observar que para un tiempo de mayor a $t = 550\tau$ la fidelidad decae, por lo cual los resultados obtenidos de la dinámica para tiempos mayores a $t = 550\tau$ no son confiables. Posteriormente se hizo este análisis para cada valor de ángulo de rotación, con $\tilde{\gamma} = 1\gamma_x$ dado que es el que presenta mayor error numérico, garantizando así, que si el cálculo hasta un tiempo dado con el mayor valor de $\tilde{\gamma}$ es bueno, entonces los de menor $\tilde{\gamma}$ también lo serán. En la figura 5.5 se muestra como la fidelidad se conserva hasta un tiempo de $t = 360\tau$ para diferentes valores de redes para una trampa $\tilde{\gamma} = 1\gamma_x$. De este análisis se puede ver los resultados que se obtengan para tiempos menores o iguales a $t = 360\tau$ no son producto de errores numéricos.

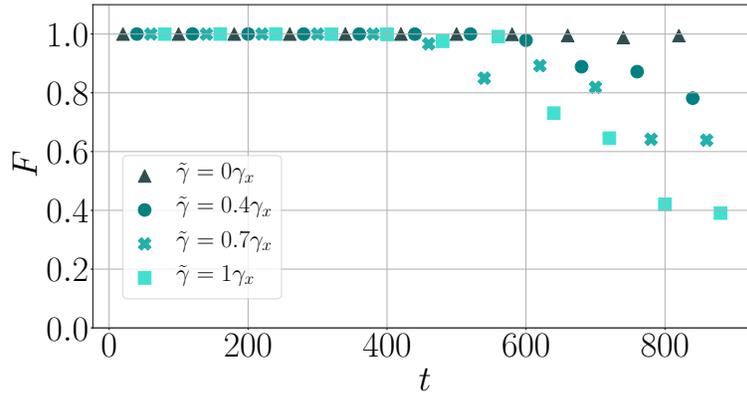


Figura 5.4: Fidelidad como función del tiempo para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales rotadas 5 grados una respecto de la otra para diferentes trampas.

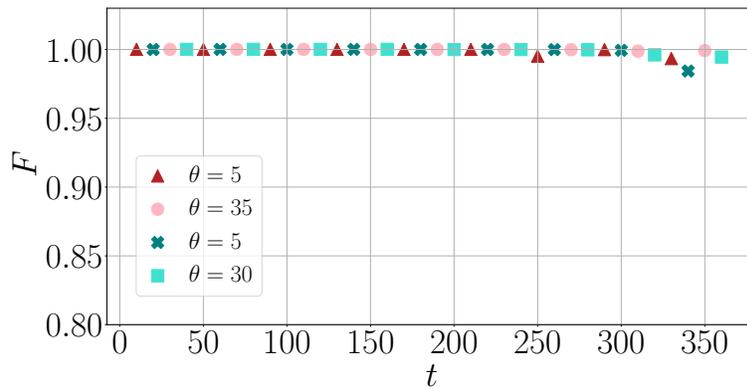


Figura 5.5: Fidelidad como función del tiempo para diferentes valores del ángulo de rotación. Para la red cuadrada se dibuja en tonos rojos, mientras que para la red Hexagonal se dibuja en tonos azules.

5.4. Protocolo de evolución temporal

Con el fin de estudiar la persistencia de la magnetización, en este trabajo se estudiaron redes de moiré definidas por un ángulo particular. Los ángulos de rotación estudiados fueron, $\theta = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 55, 60$. Por otro lado, también se quiso estudiar la influencia de la trampa armónica, por lo cual también se hizo el estudio para diferentes valores de $\tilde{\gamma}$. Los valores que se usaron fueron $\tilde{\gamma} = 0\gamma_x, 0.4\gamma_x, 0.7\gamma_x, 1\gamma_x$, siendo $\gamma_x = 0.0015$.

En primer lugar, se evolucionó el estado preparado para un ángulo rotación $\theta = 0$ para ambas redes y para cada una de las trampas. Se observó que transcurrido un tiempo la magnetización decae a cero, como se puede ver en las figuras 5.6 y 5.7. Cabe resaltar que los resultados que se presentaran de ahora en adelante, las gráficas hechas

en tonos de rojo son para redes de moiré hechas con redes cuadradas, mientras que las gráficas hechas en tonos azules son para redes de moiré hechas con redes hexagonales.

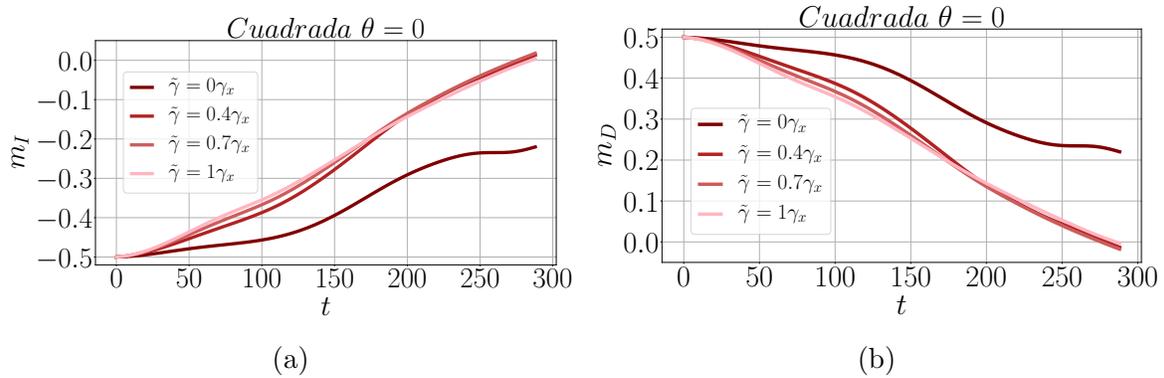


Figura 5.6: Magnetización izquierda (a) y derecha (b), para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación $\theta = 0$.

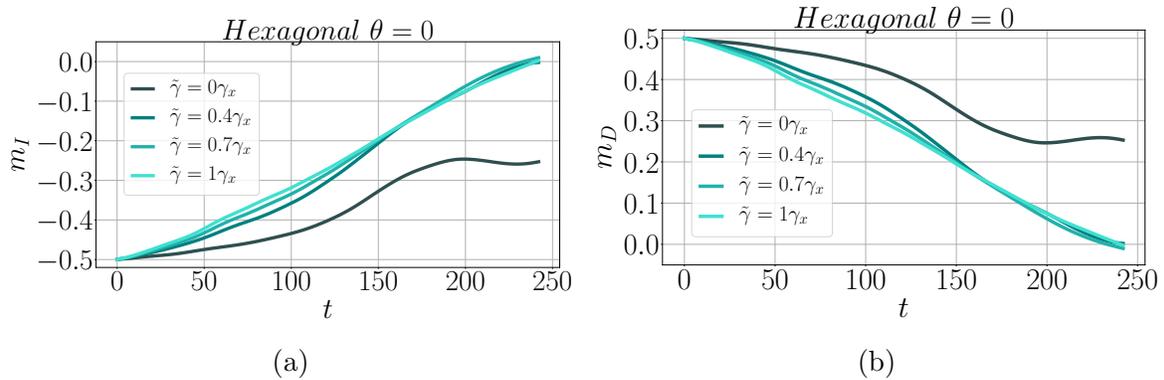


Figura 5.7: Magnetización izquierda (a) y derecha (b), para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 0$.

Dado que la magnetización decae a un tiempo aproximado de 280τ para la red de moiré hecha con redes cuadradas y de $t = 240\tau$ para la hecha con redes hexagonales se toma estos tiempos como los tiempos máximos a los que se van a evolucionar los diferentes casos. Por otro lado, como se puede ver en las figuras 5.6 y 5.7, la magnetización izquierda y derecha son un “espejo” una de la otra, entonces se decide que de ahora en adelante solo se va a presentar la magnetización derecha. Además, dado que se hicieron una gran cantidad de simulaciones a continuación se presentan las gráficas que resumen mejor los resultados.

En las figuras 5.8 y 5.9 se puede ver que, aunque los ángulos son diferentes, el comportamiento de la magnetización es el mismo. Esto se debe a que las y redes cuadrada y hexagonal son simétricas ante rotaciones de 90 y 60 grados respectivamente. Por lo tanto, los ángulos de rotación que producen redes de moiré diferentes son los que van de $\theta = 0$ hasta $\theta = \frac{\theta_s}{2}$ siendo θ_s el ángulo bajo el cual la red tiene simetría rotacional. Es

decir, por cada ángulo θ_1 en el intervalo $[0, \frac{\theta_s}{2}]$ hay un ángulo θ_2 en el intervalo $[\frac{\theta_s}{2}, \theta_s]$ que producen la misma geometría en la red de moiré y estos ángulos están relacionados de la siguiente manera, $\theta_2 = \theta_s - \theta_1$. Como se puede ver en la figura 5.10, la geometría de la red para los ángulos 40 y 50 para las redes cuadradas es la misma al igual que para los ángulos 10 y 50 para las hexagonales, debido a esto de ahora en adelante solo se reportarán ángulos comprendidos en el intervalo $[0, 45]$ para redes cuadradas y en el intervalo $[0, 30]$ para redes hexagonales.

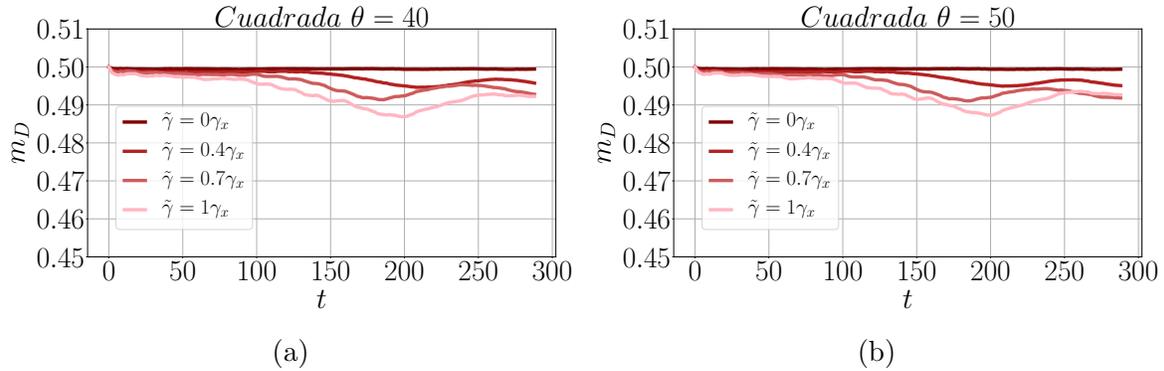


Figura 5.8: Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación $\theta = 40$ (a) y $\theta = 50$ (b).

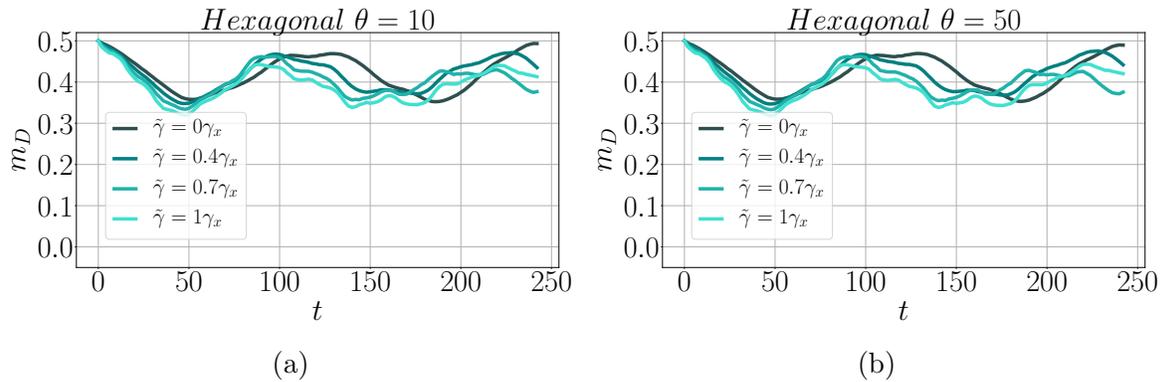


Figura 5.9: Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 10$ (a) y $\theta = 50$ (b).

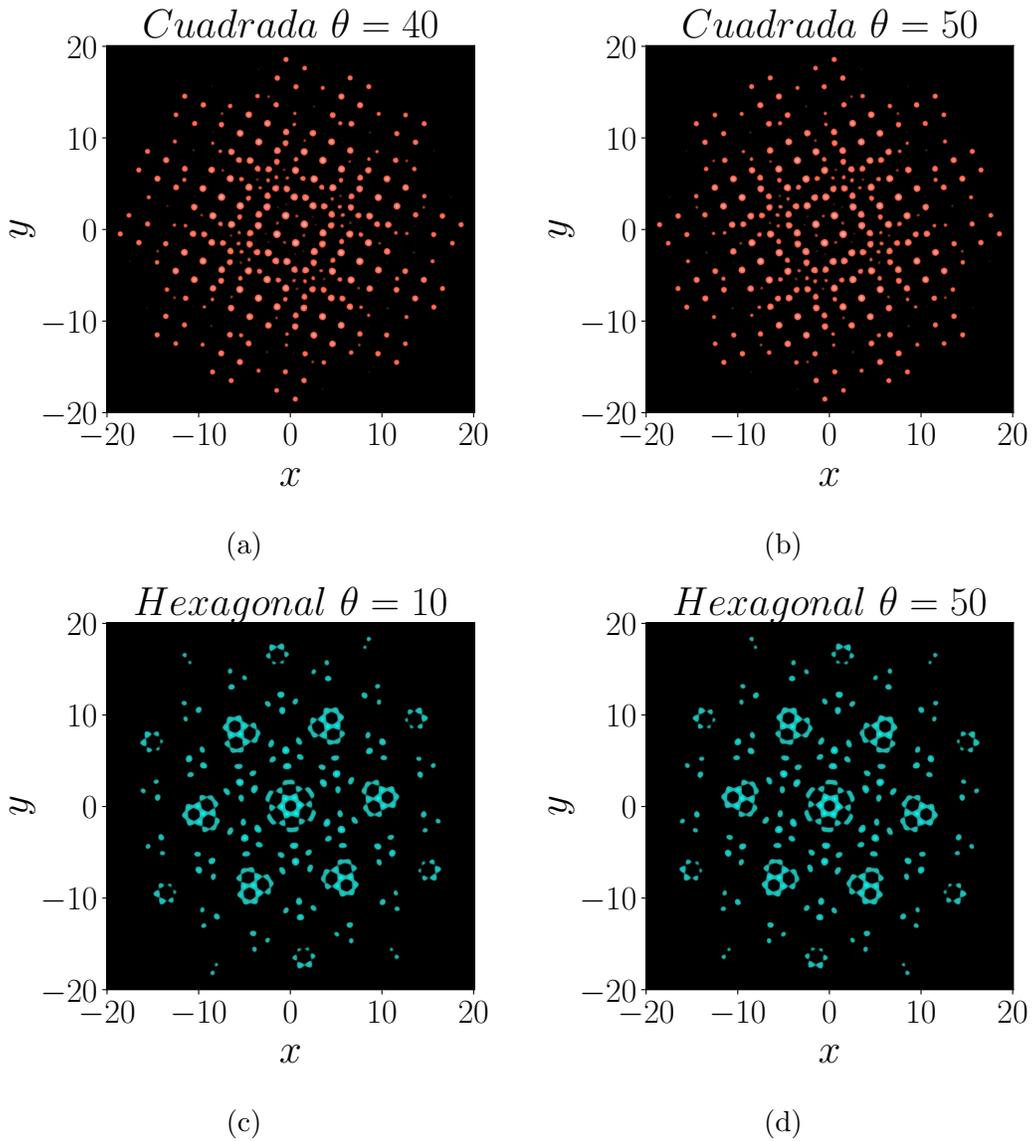


Figura 5.10: Estado estacionario para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas con un ángulo de rotación de $\theta = 40$ (a), $\theta = 50$ (b) y para una red de hecha con dos redes hexagonales con un ángulo de rotación de $\theta = 10$ (c), $\theta = 50$ (d). Todas tienen una trampa $\tilde{\gamma} = \gamma_x$.

En las figuras 5.11 y 5.12 se presenta la evolución de la magnetización para diferentes ángulos de rotación y se puede observar que a medida que el ángulo de rotación aumenta la magnetización decae menos, esto se cumple para todos los valores de $\tilde{\gamma}$. Cabe resaltar que existe un ángulo para el cual la magnetización no decae estos ángulos son $\theta = 35$ y $\theta = 30$ para las redes cuadradas y hexagonales respectivamente (ver figura 5.13).

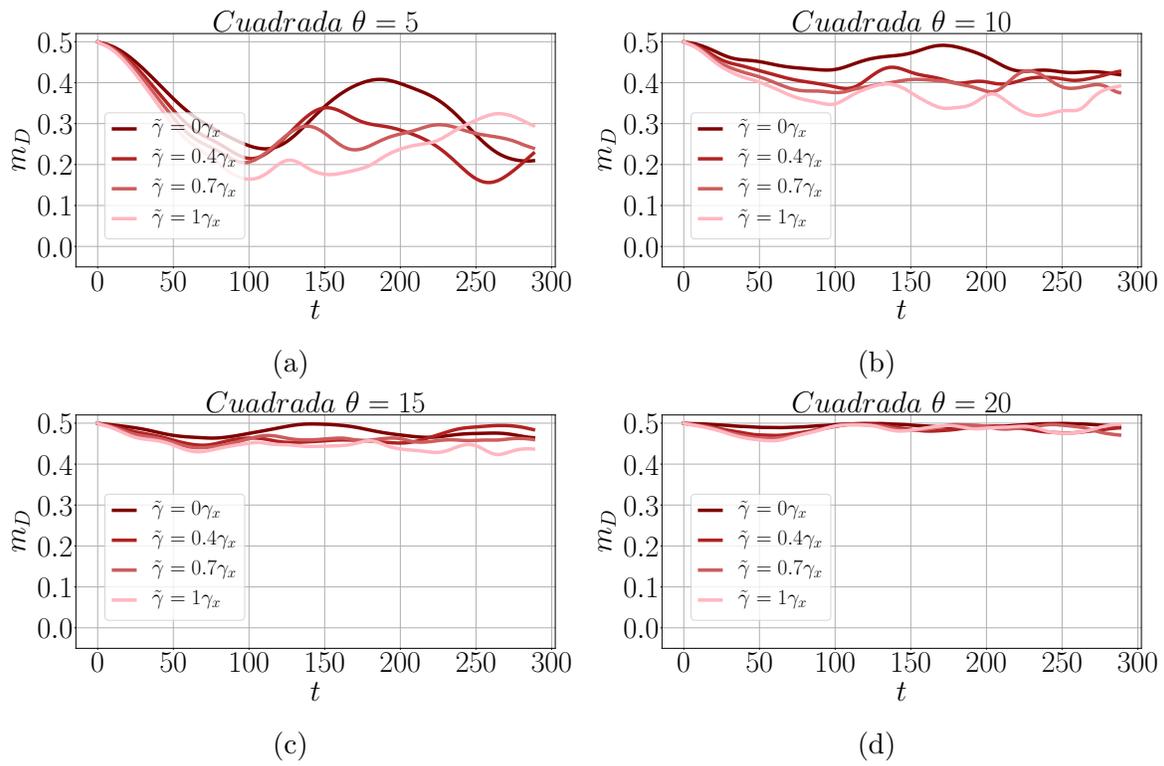


Figura 5.11: Magnetización para una red de moiré hecha con redes cuadradas y ángulos de rotación $\theta = 5$ (a), $\theta = 10$ (b), $\theta = 15$ (c), $\theta = 20$ (d).

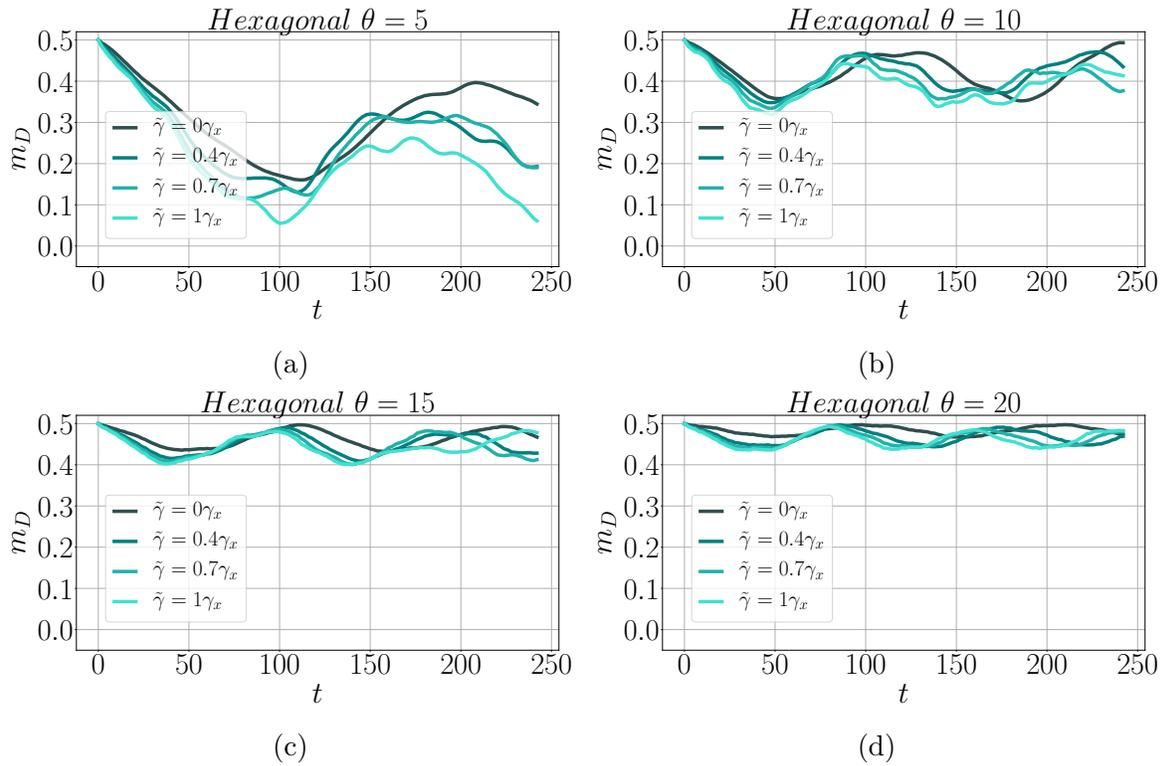


Figura 5.12: Magnetización para una red de moiré hecha con redes hexagonales y ángulos de rotación $\theta = 5$ (a), $\theta = 10$ (b), $\theta = 15$ (c), $\theta = 20$ (d).

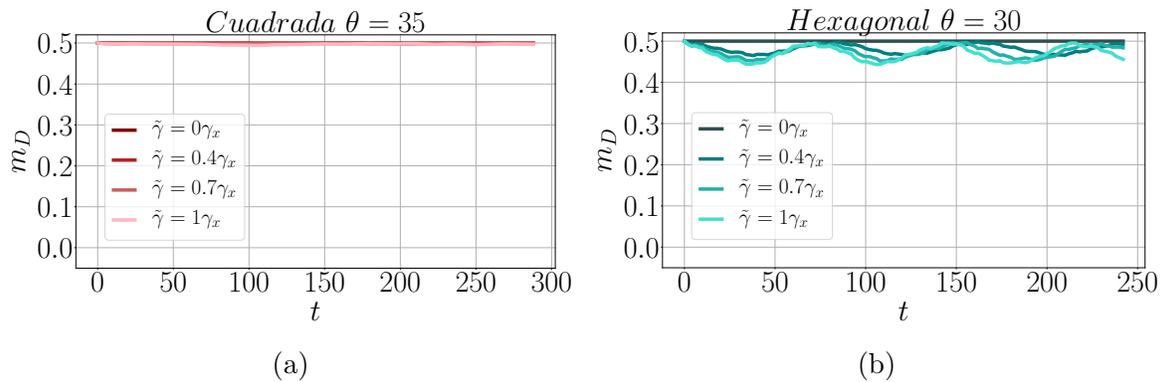


Figura 5.13: Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes cuadradas y un ángulo de rotación $\theta = 35$ (a). Magnetización para una red de moiré hecha con dos redes hexagonales y un ángulo de rotación $\theta = 30$ (b).

Otra forma de ver que la magnetización no decayó, y por lo tanto no los dominios magnéticos se quedaron prácticamente estáticos, es viendo el valor de la magnetización local a diferentes tiempos. En la figura 5.14 se gráfica la dicha observable para diferentes tiempos ($t = 0, 84, 164, 244$) para los ángulos donde más cambia la magnetización (5) y donde dicha observable se mantiene. Como se puede ver para $\theta = 5$ hay una mezcla de

las componentes alrededor del centro de la trampa, mientras que para los ángulos de $\theta = 35$ y $\theta = 30$ el cambio en la magnetización es despreciable.

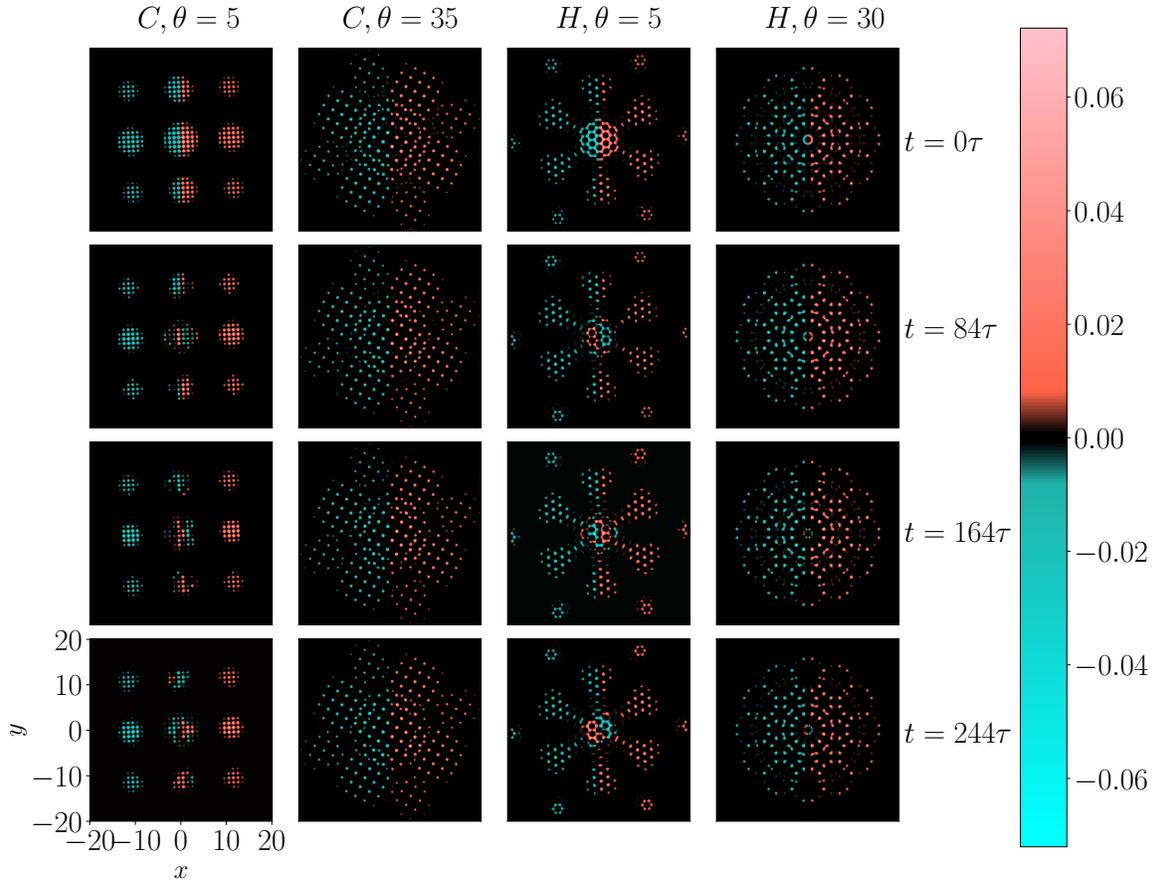


Figura 5.14: Se presenta la magnetización para una red de moiré hecha con redes cuadradas primera y segunda columna con ángulo de rotación $\theta = 5$ y $\theta = 35$ respectivamente. La tercera y cuarta columnas corresponden a una red de moiré hecha con redes hexagonales con ángulo de rotación $\theta = 5$ y $\theta = 30$ respectivamente. Las filas representan los diferentes tiempos, de arriba hacia abajo los tiempos son de 0τ , 84τ , 164τ , 244τ .

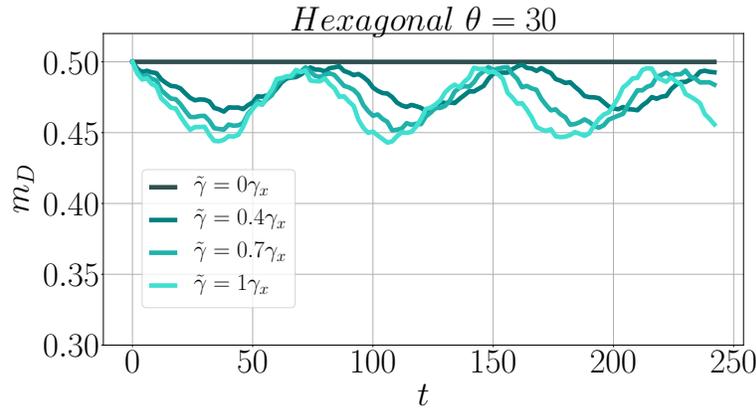


Figura 5.15: Magnetización en el lado derecho para redes hexagonales con un ángulo de rotación $\theta = 0$.

Por último, respecto a la influencia de la trampa armónica en la evolución de la magnetización, se puede decir que la consecuencia de tener este potencial inhomogéneo es que la dinámica sufre una especie de “aceleración” a medida que aumenta el ancho de la trampa. En otras palabras, y como se puede ver en la figura 5.15 la magnetización presenta oscilaciones y la frecuencia con la que oscila es mayor cuanto mayor es el valor de $\tilde{\gamma}$.

Hasta ahora se ha caracterizado la dinámica de los dominios magnéticos mediante una observable cuantitativa que es la magnetización, sin embargo, es muy útil utilizar una observable de carácter cualitativo que permite rectificar los resultados obtenidos. Dicha observable es la textura de espín, la cual es de ayuda para hacerse una idea de cómo se están comportando los dominios magnéticos. A continuación, se presenta una serie de figuras en donde se podrá observar la textura de espín para diferentes tiempos. Con el fin de observar cómo se mantiene invariante la textura de espín para cuando la red de moiré está formada por dos redes cuadradas y un ángulo de rotación $\theta = 35$ y también cuando está formada por dos redes hexagonales y un ángulo de rotación $\theta = 30$ lo cual rectifica los resultados expuestos en la figura 5.13.

Las figuras que se presentan a continuación corresponden a la textura de espín para diferentes tiempos. Para la red de moiré hecha con redes cuadradas con ángulo de rotación $\theta = 0$ (5.16, 5.17, 5.18), con ángulo de rotación $\theta = 35$ (5.19, 5.20, 5.21). Para la red de moiré hecha con redes hexagonales con ángulo de rotación $\theta = 0$ (5.22, 5.23, 5.24), y con ángulo de rotación $\theta = 30$ (5.25, 5.26, 5.27). Los tiempos que se tomaron para hacer estas figuras fueron: el inicial $t = 0$, el tiempo que le toma a la magnetización decaer a cero para el ángulo de rotación $\theta = 0$ (ver figuras 5.6, 5.7) que corresponde a $t = 284$ para redes a cuadradas, $t = 244$ para hexagonales, y un tiempo intermedio $t = 140$, $t = 124$ para cuadradas y hexagonales respectivamente. Cabe resaltar que las gráficas que se presentan son para una trampa armónica caracterizada por $\tilde{\gamma} = \gamma_x$.

En las gráficas de textura de espín se puede ver claramente cómo se mezclan las

direcciones en las que apunta los espines a medida que pasa el tiempo cuando el ángulo de rotación es $\theta = 0$, lo cual explica porque decae la magnetización en este caso. Por otro lado, en las gráficas para $\theta = 35$, no se observa cambio alguno lo cual está en concordancia con lo que se presenta en la figura 5.13a. Mientras que cuando $\theta = 35$ se puede observar que hay un pequeño cambio en la dirección de los espines en el centro mientras que el resto de la textura permanece casi constante, esto explica por qué en la gráfica 5.13b se observa que cuando se tiene trampa armónica la magnetización varía un poco.

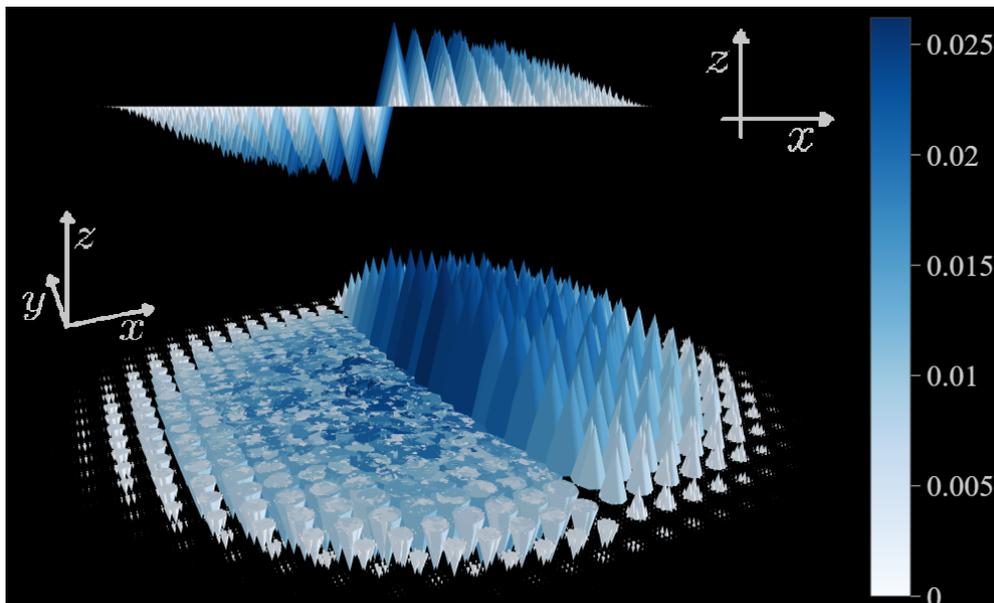


Figura 5.16: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 0\tau$.

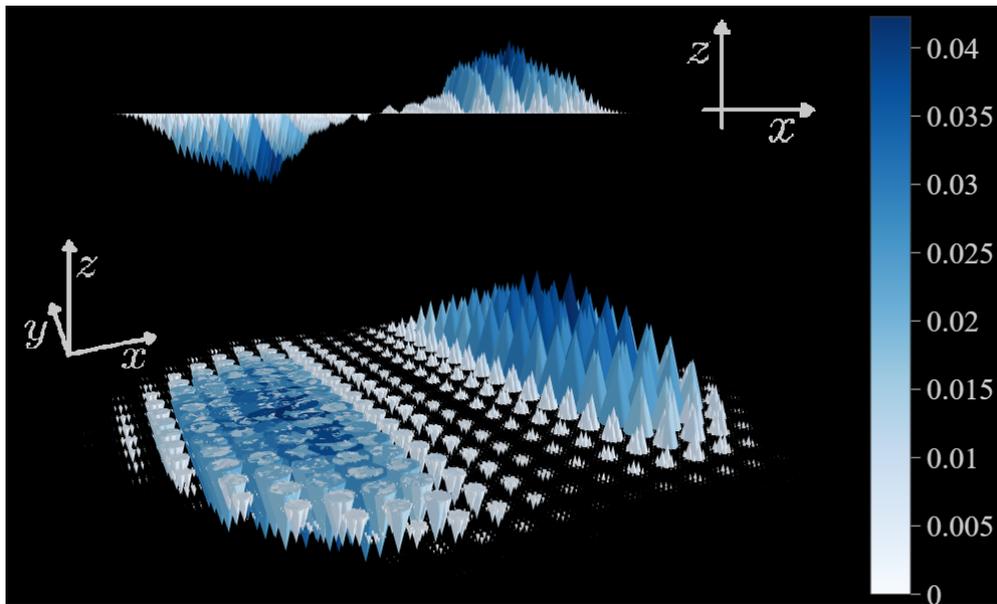


Figura 5.17: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 140\tau$.

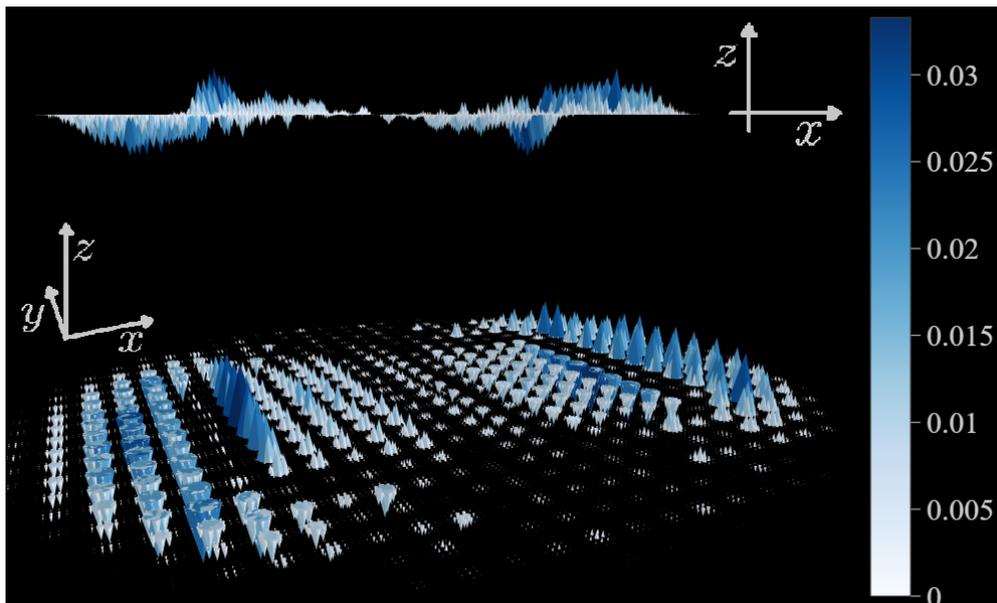


Figura 5.18: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 284\tau$.

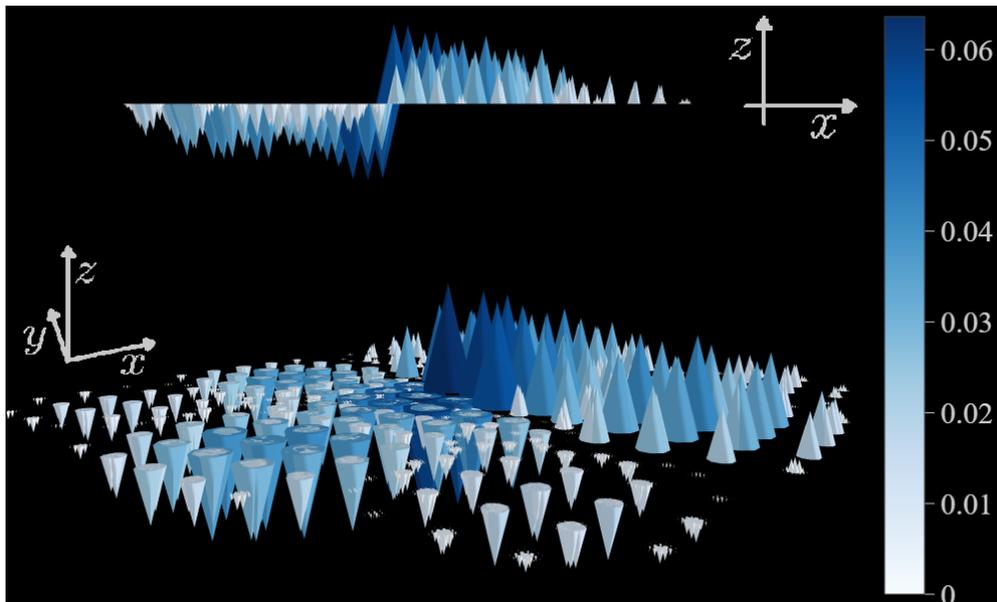


Figura 5.19: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 0\tau$.

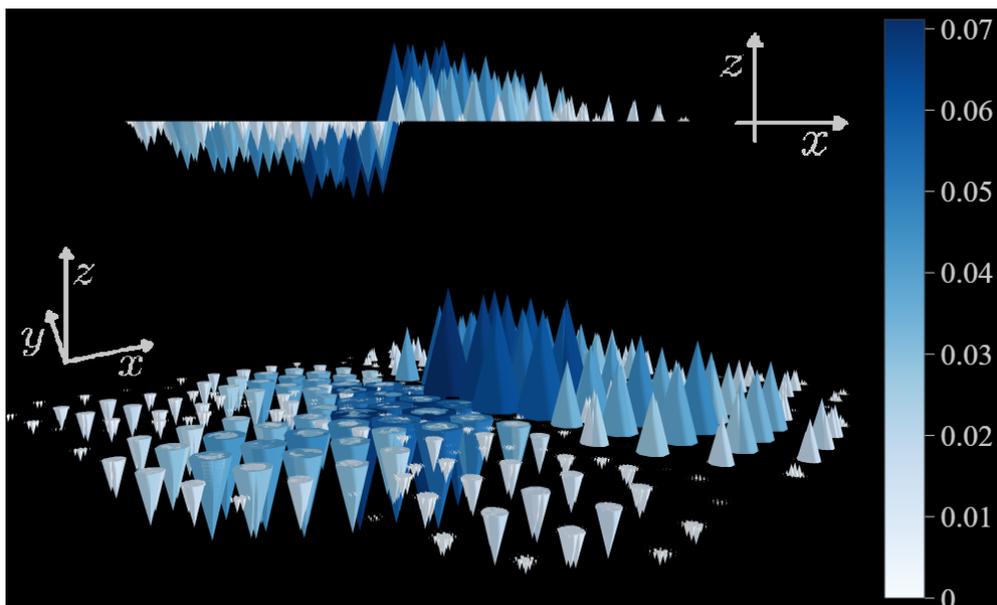


Figura 5.20: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 140\tau$.

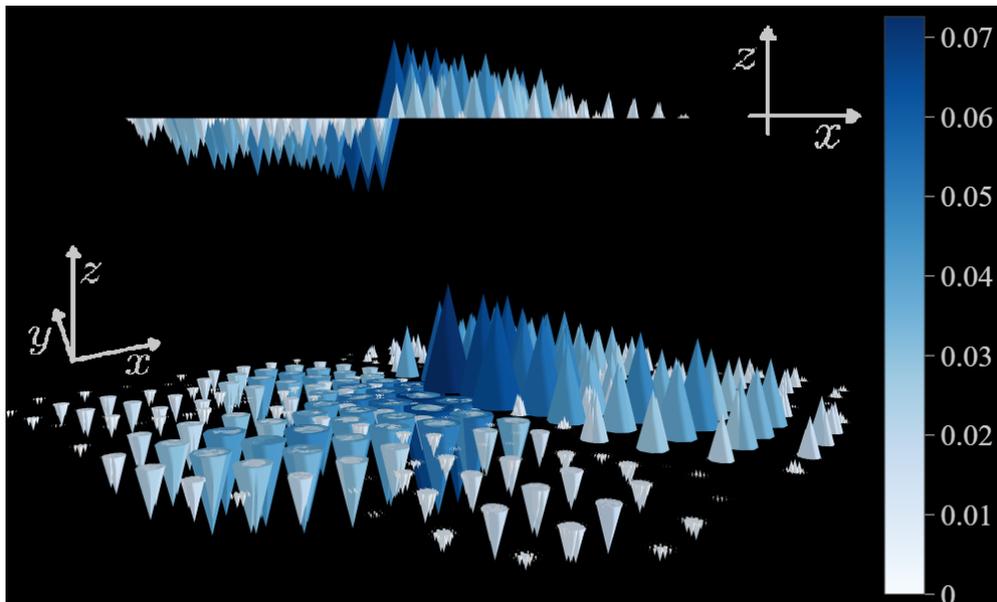


Figura 5.21: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes cuadradas, un ángulo de rotación $\theta = 35$ y a un tiempo $t = 284\tau$.

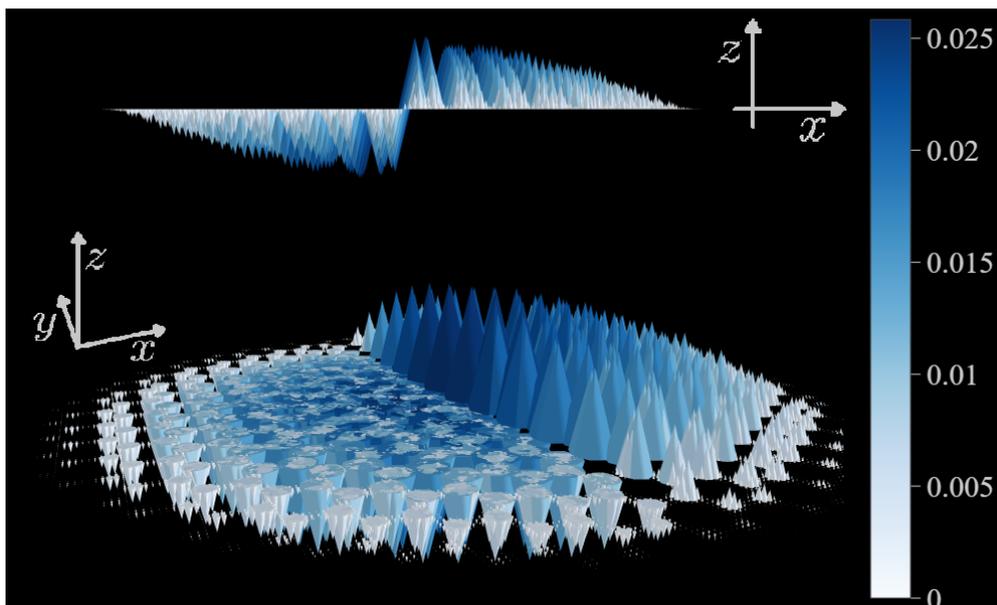


Figura 5.22: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 0\tau$.

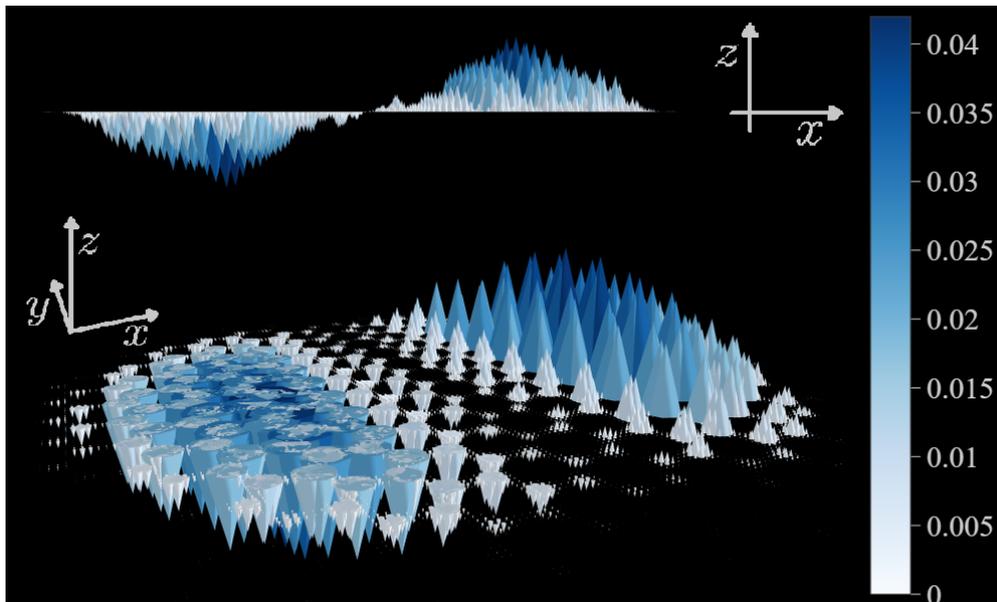


Figura 5.23: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 124\tau$.

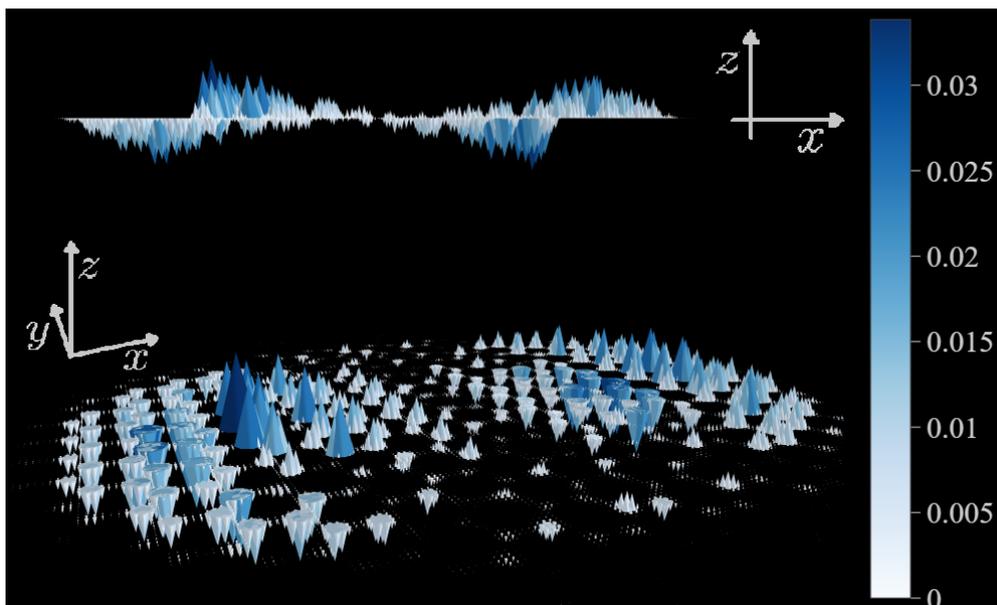


Figura 5.24: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 0$ y a un tiempo $t = 244\tau$.

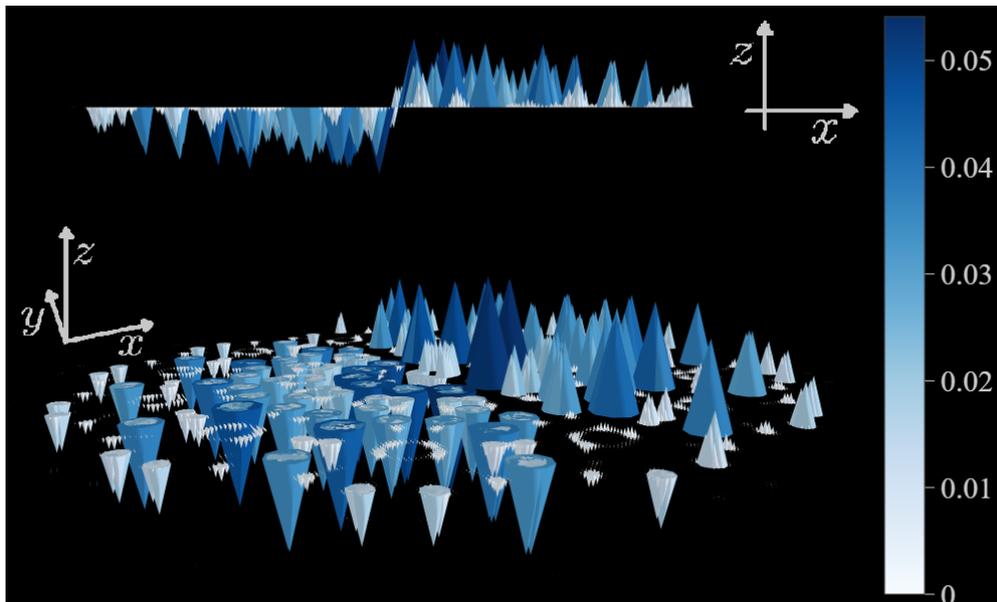


Figura 5.25: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 0\tau$.

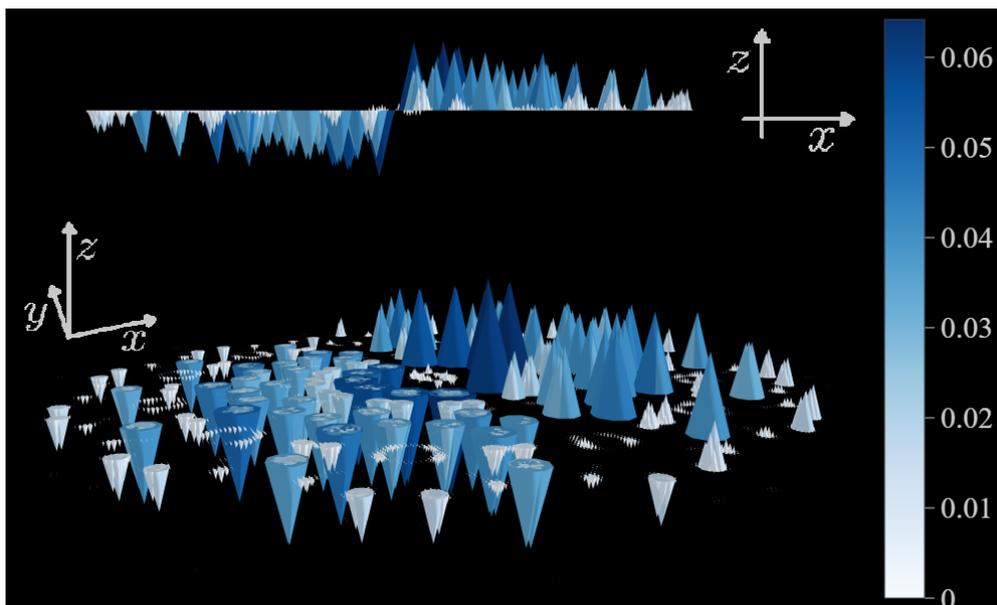


Figura 5.26: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 124\tau$.

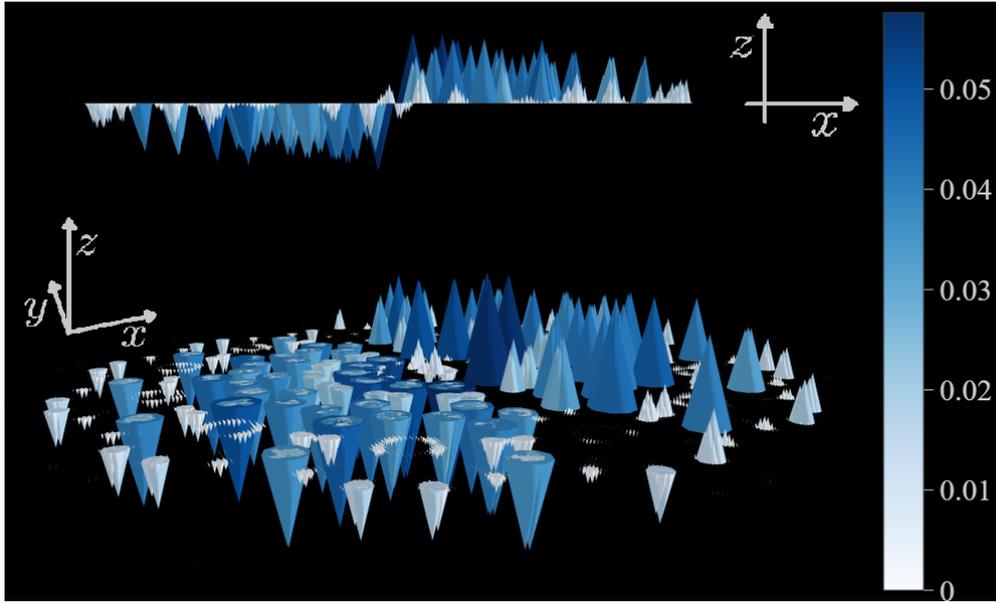


Figura 5.27: Se representa la textura de espín mediante conos que apuntan en la dirección que apuntan los espines. Se presentan dos gráficas, la superior es la vista de perfil en el plano x, z de la textura, mientras que la inferior es una vista en tres dimensiones. Aquí se está graficando la textura de espín para una red de moiré hecha con redes hexagonales, un ángulo de rotación $\theta = 30$ y a un tiempo $t = 244\tau$.

5.5. Análisis

Después de haber realizado las simulaciones y procesado los datos se puede observar lo siguiente:

1. El número de puntos con el que se discretiza el espacio y el paso temporal escogidos para este trabajo fueron 512 y 0.002 respectivamente, esto fue porque estos valores son suficientes para mantener la fidelidad hasta los tiempos de evolución que se requieren y además que el tiempo de computo no sea tan grande.
2. Se observó que para algunos ángulos (θ_1 y θ_2) el comportamiento de la magnetización es el mismo, esto se debe a la simetría rotacional de las redes originales con las que se forman las redes de moiré y estos ángulos se relacionan mediante la siguiente expresión,

$$\theta_2 = \theta_s - \theta_1, \quad (5.5)$$

siendo θ_s el ángulo de rotación bajo el cual la red original es simétrica. Dicha simetría hace que la geometría de las redes de moiré formada con los ángulos θ_1 y θ_2 sea la misma.

3. La geometría de la red (dada por el ángulo de rotación) en la que se confina a los átomos juega un papel importante en la evolución de la magnetización, debido

CAPÍTULO 5. DINÁMICA DE LA TEXTURA DE ESPÍN EN REDES DE MOIRÉ8

a que para diferentes ángulos de rotación la magnetización decae hasta un valor mínimo diferente.

4. Existe un ángulo especial para el cual la magnetización se mantiene por completo. Dicho ángulo es de 35 para las redes cuadradas y de 30 para las redes hexagonales.
5. El papel que juega la trampa armónica es crear una especie de aceleración de la dinámica de la magnetización. Esta conclusión se desprende del comportamiento de todos los valores de $\tilde{\gamma}$ considerados. Entre mayor sea el valor de $\tilde{\gamma}$ mayor será la frecuencia con que oscile la magnetización.

5.6. Conclusiones

Este trabajo tuvo como objetivo estudiar la dinámica de dominios magnéticos, en particular, la persistencia de la magnetización y la textura de espín en redes de moiré bidimensionales. El interés de este estudio nace en el contexto de las heteroestructuras de Van der Waals que son materiales fabricados al apilar cristales bidimensionales, dichas heteroestructuras tienen una aplicación en la espintrónica debido a sus propiedades magnéticas. Para alcanzar el objetivo propuesto, en el presente trabajo se propone utilizar un condensado de Bose con interacciones confinado en una red de moiré como el sistema a través del cual se simularán las heteroestructuras de Van der Waals. Dicho gas está compuesto por una mezcla de átomos que pueden estar en dos estados hiperfinos, uno con proyección de espín $+1$ y otro con proyección -1 . Además, se consideró dos tipos de redes de moiré, el primero fabricado con redes cuadradas y el segundo fabricado con redes hexagonal.

Primero se realizó una breve descripción de los potenciales de interacción que se pueden tener en cuenta, y debido a que se quería trabajar con átomos de ^{87}Rb los cuales no tienen un momento dipolar magnético considerable, el potencial modelo que se escoge es el de contacto. Posteriormente se hizo la deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii para varias componentes [2.70](#), la cual es en realidad un sistema de dos ecuaciones diferenciales no lineales por lo cual no tiene solución analítica. Debido a esto la solución se debe encontrar usando métodos numéricos como evolución en tiempo imaginario para el estado estacionario y Runge Kutta de cuarto orden para la evolución temporal. Antes de pasar al tratamiento numérico de la ecuación que describe al condensado, se propone que el potencial de confinamiento es una red de moiré aunado a una trampa armónica debido a que dicha trampa siempre está presente en los experimentos de átomos ultrafríos.

Teniendo en cuenta que el problema que se quiso estudiar fue la dinámica de dominios magnéticos en dos dimensiones se hizo el respectivo análisis de cómo se modifican las constantes de interacción al pasar de resolver el problema en tres dimensiones a dos dimensiones. Posteriormente se hizo el respectivo tratamiento numérico para la solución del sistema de ecuaciones que describen el gas. Una vez resueltas numéricamente las ecuaciones, se procedió a estudiar la dinámica de dominios magnéticos para diferentes valores tanto de la frecuencia de la trampa armónica como del ángulo de rotación de las redes de moiré, y se encontró que la influencia de la trampa armónica es acelerar la dinámica de los dominios magnéticos, mientras que en respecto al ángulo de rotación se observó que existen ángulos para los cuales la magnetización y la textura de espín se conservan en el tiempo. Después de hacer el respectivo análisis a los resultados obtenidos en cada uno de los casos estudiados se llegó a las siguientes conclusiones.

1. La magnetización presenta oscilaciones periódicas.
2. La frecuencia de oscilación de la magnetización es proporcional a la frecuencia de la trampa.
3. A medida que se aumenta el ángulo de rotación, el valor mínimo que alcanza la

magnetización es mayor.

4. Existen ángulos especiales para los cuales la magnetización se conserva. Estos ángulos son: 35 para las redes cuadradas y 30 para la hecha con redes hexagonales.

5.6.1. Perspectiva

Este trabajo fue realizado considerando átomos de ^{87}Rb los cuales no tienen un momento dipolar magnético considerable, por lo cual el potencial modelo para la interacción entre partículas fue un potencial de contacto. Se propone ampliar este estudio para átomos de ^{52}Cr , ^{160}Dy o ^{168}Er los cuales se caracterizan precisamente, por tener un momento dipolar magnético grande, entonces en la descripción del gas se debe considerar una interacción de largo alcance, y sería interesante observar la influencia de dicha interacción en la dinámica de dominios magnéticos.

Apéndice A

Interacción efectiva en la ecuación de Gross-Pitaevskii

A.1. Desarrollo en ondas parciales

Se puede escribir $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ como un desarrollo de funciones de Bessel y armónicos esféricos [40] de la siguiente manera

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l Y_l^m(\theta_k, \phi_k) j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (\text{A.1})$$

dado que el vector \mathbf{k} esta en dirección z entonces $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikz} = e^{ikr \cos(\theta)}$ es decir no depende del ángulo polar ϕ por lo cual $m = 0$,

$$e^{ikz} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l Y_l^0(\theta_k, \phi_k) j_l(kr) Y_l^0(\theta, \phi), \quad (\text{A.2})$$

por otro lado, los armónicos esféricos para $m = 0$ están dados por, $Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos(\theta))$, sustituyendo esta expresión en la ecuación A.2 se tiene,

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos(\theta)), \quad (\text{A.3})$$

por otro lado, dado que se está analizando el caso para r muy grande se puede decir que $kr \gg 1$ entonces para este caso se puede aproximar la función de Bessel a $j_l =$

$\frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$, reemplazando esta expresión en la ecuación A.3 se tiene,

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2ikr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos(\theta)) \\ e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2ikr} \left(e^{ikr} e^{-\frac{l\pi}{2}} - e^{-ikr} e^{\frac{l\pi}{2}} \right) P_l(\cos(\theta)) \\ e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \left(e^{ikr} i^l (-i)^l - e^{-ikr} i^l i^l \right) P_l(\cos(\theta)) \\ e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikr} \left(e^{ikr} - e^{-ikr} (-1)^l \right) P_l(\cos(\theta)), \end{aligned}$$

entonces se puede expresar e^{ikz} como un desarrollo de polinomios de Legendre,

$$e^{ikz} = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\cos\theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos\theta). \quad (\text{A.4})$$

A.2. Interacción efectiva en el espacio de momentos

A continuación, se encontrará la Transformada de Fourier de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dada por

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \Psi(r) + V(r) \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (\text{A.5})$$

para el primer término $-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \Psi(r)$ basta con recordar que la TF de la n-ésima derivada está dada por $(ik')^n \tilde{\Psi}(k')$, entonces la transformada de Fourier del primer término será,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\Psi}(k'). \quad (\text{A.6})$$

Ahora la TF del segundo término está dado por,

$$\int_v d^3r V(r) \Psi(r) e^{-ik'r}. \quad (\text{A.7})$$

usando la ecuación 2.18 para reemplazar $V(r)$ y $\Psi(r)$ en la ecuación anterior se tiene

$$\begin{aligned} & \int_v d^3r \frac{1}{v} \sum_{k'''} \tilde{V}(k''') e^{ik''r} \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{\Psi}(k'') e^{ik''r} e^{-ik'r} \\ &= \frac{1}{v} \sum_{k'''} \tilde{V}(k''') \sum_{k''} \tilde{\Psi}(k'') \frac{1}{v} \int_v d^3r e^{-i\mathbf{r} \cdot [k''' - (k' - k'')]} \\ &= \frac{1}{v} \sum_{k'''} \tilde{V}(k''') \sum_{k''} \tilde{\Psi}(k'') \delta(k''' - (k' - k'')) \\ &= \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}(k'') \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Entonces la Transformada de Fourier de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\Psi}(k') + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}(k'') = E \tilde{\Psi}(k'), \quad (\text{A.9})$$

Bibliografía

- [1] E. C. Ahn, *npj 2D Materials and Applications* **4** 17 2020
- [2] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472 1988
- [3] N. Kheirabadia, A. Shafiekhaniab, and M. Fathipourc, *Superlattices and Microstructures.* **74** 123 2014
- [4] K. Tsukagoshi, B. W. Alphenaar and H. Ago, *Nature* **392** 151 1998
- [5] A. R. Rocha¹, T. B. Martins, A. Fazzio¹, and A. J R da Silva, *Nanotechnology* **21** 34 2010
- [6] O. V. Yazyev, and L. Helm, *Phys. Rev. B* **75** 125408 2007
- [7] R. R. Nair, M. Sepioni, I-Ling Tsai, O. Lehtinen, J. Keinonen, A. V. Krasheninnikov, T. Thomson, A. K. Geim, and I. V. Grigorieva, *Nature Physics* **8** 199 2012
- [8] B. Uchoa, V. N. Kotov, N. M. R. Peres, and A. H. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **101** 026805 2008
- [9] X. Hong, S.-H. Cheng, C. Herding, and J. Zhu, *Phys. Rev. B* **83** 085410 2011
- [10] N. Alem, R. Erni, C. Kisielowski, M. D. Rossell, W. Gannett, and A. Zettl, *Phys. Rev. B* **80** 155425 2009
- [11] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, *Nature Nanotechnology* **7** 699 2012
- [12] A. K. Geim, and I. V. Grigorieva, *Nature* **499** 419 2013
- [13] X. Xiong, M. Huang, B. Hu, X. Li, F. Liu, S. Li, M. Tian, T. Li, J. Song, and Y. Wu, *Nature Electronics* **3** 106 2020
- [14] T. Song, X. Cai, M. Wei-Yuan Tu, X. Zhang, B. Huang, N. P. Wilson, K. L. Seyler, L. Zhu, T. Taniguchi, K. Watanabe, M. A. McGuire, D. H. Cobden, D. Xiao, W. Yao, and X. Xu, *Science* **360** 6394 2018
- [15] G. Oster and Y. Nishijima, *Scientific American* **208** 5 1963

-
- [16] K. Tang, and W. Qi, *Advanced Functional Materials* **30** 32 2020
- [17] C. Gross, and I. Bloch, *Science* **357** 6355 2017
- [18] O. Morsch and M. Oberthaler, *Rev. Mod. Phys.* **78** 179 2006
- [19] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82** 1225 2010
- [20] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics*. Pergamon Press, Third edition, 1977
- [21] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn and W. Ketterle, *Nature* **392** 151 1998
- [22] D. M. Bauer, M. Lettner, C. Vo, G. Rempe and S. Dürr, *Nature Physics* **5** 339 2009
- [23] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler and T. Pfau, *Phys. Rev. Lett.* **94** 160401 2005
- [24] Y. Tang, N. Q. Burdick, K. Baumann, and B. L. Lev1, *New J. Phys.* **17** 045006 2015
- [25] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, and F. Ferlaino, *Phys. Rev. Lett.* **108** 210401 2012
- [26] D. J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*. Prentice Hall, Third edition, 1999
- [27] Tin-Lun Ho, *Phys. Rev. Lett.* **81** 742 1998
- [28] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, *Science*. **42** 95 2000
- [29] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80** 885 2008
- [30] R Zamora-Zamora, G A Domínguez-Castro, C Trallero-Giner, R Paredes and V Romero-Rochín, *Journal of Physics Communications* **3** 085003 2019
- [31] C. V. Parker, Li-Chung Ha, and C. Chin, *Nature Physics* **9** 769 2013
- [32] Roberto Antonio Zamora-Zamora, Tesis de doctorado: Excitaciones cuánticas macroscópicas en condensados de bose-einstein: vórtices, skyrmiones y turbulencia. 2018
- [33] Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau, B. Battelier, and J. Dalibard, *Nature* **441** 1118 2006
- [34] Chen-Lung Hung, X. Zhang, N. Gemelke, and C. Chin, *Nature* **470** 236 2011
- [35] P. Bader, S. Blanes, and F. Casas, *J Chem Phys* . **139(12)** 124117 2013
- [36] C. Madroño, G. A. Domínguez-Castro, L. A. González-García, and R. Paredes, *Phys. Rev. A* **102** 033304 2020

-
- [37] K. Hussain, F. Ismail, and N. Senu, *ResearchGate* **2** 1 2015
- [38] P. Yang and Y. Shen, *Journal of Uncertainty Analysis and Applications* **3** 17 2015
- [39] J.-Y. Choi, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, A. Rubio-Abadal, T. Yefsah, V. Khemani, D. A. Huse, I. Bloch, and C. Gross, *Science* **352** 6293 2016
- [40] Cohen-Tannoudji, *Quantum mechanics*. Wiley, First edition, 1977
- J.-Y. Choi, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, A. Rubio-Abadal, T. Yefsah, V. Khemani, D. A. Huse, I. Bloch, and C. Gross,