



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

GASES CUÁNTICOS EN ESTRUCTURAS PERIÓDICAS Y
APERIÓDICAS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:
EMILIO IZCOATL GUERRERO CRUZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. MIGUEL ÁNGEL SOLÍS ATALA
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

COMITÉ TUTOR
DR. RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM
DR. FRANCISCO MORALES LEAL
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES,
UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca

Secretario: Dr. José Alberto Martín Ruiz

Primer Vocal: Dr. Miguel Ángel Solís Atala

Segundo Vocal: Dr. Pablo de la Mora y Palomar Askinasy

Tercer Vocal: Dr. Doroteo Mendoza López

TUTOR DE TESIS:

Dr. Miguel Ángel Solís Atala
Instituto de Física, UNAM

Siempre a mi madre, gracias por todo.

Reconocimientos

El primer agradecimiento siempre será a mi madre, gracias por seguirme acompañando en todos los logros que he tenido, si he llegado a algún lugar que valga la pena reconocer es por tu guía. Gracias siempre.

Gracias a Gema, no hay forma de poner en palabras todo lo que me has enseñado, gracias por tu amor, tus enseñanzas, tus consejos y por tu apoyo, más en los momentos difíciles.

Enlistar y agradecer a todas las personas que me han ayudado tomaría demasiado tiempo, sin embargo tomaré la opción de mencionar a algunas, esto sin menospreciar a las que olvide, gracias a Marco, Rodrigo, Roger, Kike, Chino, Andrea, Jackez y todos los amigos y familiares que de alguna forma dejaron algo para completar esta tesis.

Gracias al Dr. Miguel Ángel Solís Atala por su guía, su amistad y por alentarme siempre a seguir trabajando de la mejor manera, por permitirme trabajar con él y por tener confianza en mí, especialmente cuando yo la estaba perdiendo.

Gracias al Dr. Omar Abel Rodríguez López, sin su ayuda en Python, su guía y sus consejos esta tesis no se habría completado.

Gracias a mi comité tutor conformado por el Dr. Ricardo Méndez Fragoso y el Dr. Francisco Morales Leal por sus valiosas aportaciones y su seguimiento semestre a semestre.

Gracias al CONACYT y el posgrado de Ciencias e Ingeniería en Materiales por otorgarme la beca de maestría y permitir que completara mi formación.

Declaración de autenticidad

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Emilio Izcoatl Guerrero Cruz. Ciudad Universitaria, CDMX, 2023,

Resumen

En esta tesis tenemos como objetivo analizar un sistema físico el cual consiste en un gas de bosones permanentes débilmente interactuantes, dentro de estructuras periódicas perfectas o imperfectas, las cuales generamos aplicando al gas de Bose un potencial Peine de Dirac completo o incompleto en el número de deltas, respectivamente. La inexistencia de deltas son defectos puntuales denominados vacancias que introducimos aleatoriamente y en proporciones controladas. En estas condiciones, calculamos las propiedades del estado base del gas de Bose tales como su energía y el potencial químico, como funciones de la magnitud de la interacción repulsiva entre bosones y de la fracción de vacancias. También se calcula la función de densidad de probabilidad y se grafican mostrando su localización en las posiciones de las vacancias. Como resultados significativos encontramos que la presencia de vacancias disminuye la energía del sistema haciendo tender a una estabilidad, no fue posible encontrar una proporción de vacancias que maximice la energía del estado base, por otro lado encontramos que las interacciones repulsivas hacen que la localización de las partículas se pierda y que mientras mayor sea la interacción las partículas se dispersan más, otro resultado llamativo sería que el potencial químico se vuelve mayor que la energía del estado base para los sistemas con interacciones.

La tesis se desarrolla de la siguiente manera. En el Capítulo 1 se hace una introducción de los temas a estudiar mostrando la importancia de las estructuras periódicas y cuasi-periódicas, además se da una presentación de los antecedentes que motivan esta tesis. En el Capítulo 2 se introduce la noción de los gases de bosones, donde se resume algunas propiedades del gas ideal de bosones, mostrando los conceptos que utilizaremos adelante tales como la condensación Bose-Einstein (CBE). También revisamos brevemente al gas de bosones débilmente interactuante, explicando la aproximación de campo medio que nos conduce a la ecuación de Gross-Pitaevskii la cual tenemos que resolver para analizar las propiedades del gas de bosones en los capítulos posteriores. Al final damos un

breve resumen de los antecedentes del gas débilmente interactuante en una y en cuasi-una dimensión mostrando la energía del estado base del gas de Lieb-Liniger. En el Capítulo 3 discutimos el gas ideal de Bose dentro de cristales, empezando por mostrar cómo es que el potencial de Kronig-Penney en su límite del Peine de Dirac se asemeja a una estructura cristalina, también se muestra cómo es que se introdujeron las vacancias en el sistema, por último se muestran la energía por partícula para los gases de Bose ideales dentro de estructuras periódicas perfectas e imperfectas, además se da un ejemplo de cómo afecta a la energía la presencia de vacancias en el sistema. En el Capítulo 4 unimos las nociones del gas de bosones interactuante y de las estructuras periódicas para hacer una descripción del gas de Bose débilmente interactuante dentro de un cristal con y sin imperfecciones. Además se da una descripción de los métodos de diferencias finitas y de tiempo imaginario que fueron utilizados para resolver de manera computacional los sistemas planteados en esta tesis. En el Capítulo 5 se muestran los resultados obtenidos para la energía del estado base así como el potencial químico para el gas de Bose ideal más el gas de Bose débilmente interactuante con tres valores diferentes de interacción. Las energías son presentadas como función de la proporción de vacancias. En el Capítulo 6 damos nuestras conclusiones donde resalta que la presencia de la estructura perfecta hace que la energía del estado base del gas de Bose aumente de manera proporcional a la intensidad de las deltas pero que la aparición de las vacancias la disminuye proporcionalmente a la fracción de vacancias.

Índice general

Índice de figuras	xii
1. Introducción	1
2. Gases ideales de Bose	5
2.1. Gas ideal de Bose	5
2.2. Gases de Bose débilmente interactuantes	7
2.2.1. Gas de Bose débilmente interactuante libre	7
2.2.2. Ecuación de Gross-Pitaevskii	9
2.3. Gas de Bose en cuasi unadimensión.	11
2.4. Gas de Bose de Lieb-Liniger	12
3. Gas de Bose en cristales perfectos e imperfectos	15
3.1. Cristales perfectos e imperfectos	15
3.1.1. Gas de Bose ideal dentro de cristales perfectos e imperfectos	17
3.1.1.1. Espectros de energía	17
4. Gases débilmente interactuantes dentro de cristales	21
4.1. Gas de Bose con interacciones	21
4.2. Método de diferencias finitas	22
4.3. Método de tiempo imaginario	24
4.4. Modelado del Potencial Peine de Dirac	25
5. Propiedades del estado base del gas de Bose débilmente interactuante	29
5.0.1. Variación de la delta central del sistema hasta crear una vacancia	30
5.0.2. Variación de una fracción de vacancias	31
5.0.3. Densidad de probabilidad del estado Base	35
5.0.4. Brecha	38
5.0.5. Regresión al infinito	39

ÍNDICE GENERAL

5.0.6. Energía del estado base y potencial químico para diferentes sistemas	40
6. Conclusiones	43
Bibliografía	45

Índice de figuras

2.1. Figura de $e(\gamma)$ con $\gamma = 2/n_1 a_{1D}$, las unidades de energía son $\hbar^2/2ma^2$	13
3.1. Potencial de Kronig-Penney.	16
3.2. Potencial Peine de Dirac.	17
3.3. Gráfica de $f(P, \alpha)$ vs. αa con $P_0 = 10$	18
3.4. Bandas de energías obtenidas al resolver el sistema de KP con el potencial peine de Dirac formado por 101 deltas sin vacancias, $P_0 = 10$	19
3.5. Bandas de energías obtenidas al resolver el sistema de KP con el potencial peine de Dirac formado por 101 deltas con 20 vacancias aleatorias $P_0 = 10$	20
4.1. Evolución de la forma en que se toma la partición del espacio para llegar a levantar un punto. Se respeta que el área de los rectángulos es 1	26
4.2. Rectángulo formado por un sólo punto, las paredes están entre x y $x \pm h$	27
5.1. Energía del estado base para un sistema de 12 deltas totales, en una de ellas se hizo una variación, estos sistemas contaban con y sin interacciones entre partículas, los casos con interacción son tres, $g = 0.5, 1, 2$, en todos los casos se varió una delta para analizar la evolución de la energía del estado base.	31
5.2. Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 %, 50 % y 100 %, $P_0 = 10$ y $g = 0$	32
5.3. Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 % y 50 %, $P_0 = 10$ y $g=1$	34

ÍNDICE DE FIGURAS

5.4. Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 % y 50 %, $P_0 = 10$ y $g = 2$	35
5.5. Densidad de probabilidad de un sistema con 10 deltas iniciales, posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 0.5$	36
5.6. Densidad de probabilidad de un sistema con 10 deltas iniciales, posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 1$	37
5.7. Densidad de probabilidad un sistema 10 deltas iniciales posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 2$	38
5.8. Extrapolación de la energía del estado base cuando el longitud del sistema tiende a infinito. Encontramos que el valor es de $8.7241 \hbar^2/2ma^2$ para $P_0 = 10$ y $g = 1$	39
5.9. Valores de la energía graficados junto a la energía de Lieb-Liniger, los valores se encuentran en la tabla 5.6	41

Introducción

Las partículas cuánticas se clasifican en bosones y fermiones, la diferencia entre ellas se da en una característica cuántica conocida como espín; los fermiones tienen un espín semi-entero mientras que los bosones tienen un espín entero. A diferencia de los fermiones, varios bosones pueden compartir el mismo estado cuántico al grado de poder poblar abruptamente el nivel de energía más bajo accesible a los bosones, es decir, desarrollar una condensación Bose-Einstein (CBE). Este fenómeno ocurre cuando la temperatura del gas de Bose está por debajo de una temperatura conocida como la temperatura crítica de CBE, a partir de la cual una fracción significativa del total de partículas del gas adquieren la energía del estado base. La CBE fue predicha teóricamente en 1925 por A. Einstein [1] y observada en el laboratorio setenta años después por E. Cornell y C. Wiemann en un gas de átomos de Rubidio [2] y sólo unos meses después observada también en un gas de átomos de Sodio por W. Ketterle [3].

Semejante logro experimental obtenido en 1995 abrió la puerta a un sin número de estudios de las propiedades de los gases cuánticos y en particular de los gases de bosones atrapados por diferentes potenciales externos, es decir, desde simples trampas cuasi-unidimensionales en forma de cigarro hasta en redes periódicas realizadas con láseres contrapuestos. Teóricamente sabemos que la CBE de un gas ideal de bosones (GIB) libre se presenta a una temperatura diferente de cero cuando la dimensión d del gas es mayor a la potencia del momento lineal en la relación energía-momento de los bosones, es decir, $d > 2$ [4]. Sin embargo, cuando el GIB está sujeto a un potencial externo es posible que se presente la CBE en dimensiones menores o iguales a dos [4, 5, 6].

Siguiendo esta línea de investigación nos propusimos estudiar las propiedades del gas ideal de bosones dentro de estructuras periódicas generadas con potenciales periódicos como los de las redes ópticas que resultan de la superposición de haces de luz de láser en direcciones opuestas, esto en una, dos o tres dimensiones. Empezamos con los estudios del gas de ideal de bosones sujetos a potenciales externos donde hemos observado que la aparición de imperfecciones en las estruc-

1. INTRODUCCIÓN

turas periódicas propicia la aparición de la CBE aún en 1 y 2 dimensiones [5, 7]. Como antecedente del efecto de introducir desorden en estructuras ordenadas en las que habita un IBG, sobre su temperatura crítica de CBE, es el trabajo de J.M. Luttinger quien mostró en 1973 que en un gas de bosones no interactuantes en una dimensión la presencia de vacancias en el potencial periódico aumenta la temperatura crítica en la cual ocurre la CBE [8, 9]. Por otro lado, se ha encontrado que existe una proporción exacta de vacancias que maximiza la magnitud de la temperatura crítica de CBE [10].

El estudio de los gases de bosones ha avanzado, dejando atrás los sistemas ideales y empezó a tomar en cuenta las interacciones entre las partículas que conforman el gas. Para obtener las propiedades del gas de bosones interactuantes se han propuestos diversos métodos, entre ellos uno de los más socorridos es el de usar la aproximación de campo medio que conduce a resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii, para bosones débilmente interactuantes y densidades altas.

En la aproximación de campo medio se ha estudiado al gas de bosones débilmente interactuante dentro de estructuras periódicas y se ha podido resolver de manera analítica la correspondiente ecuación de Gross-Pitaevskii [11], como un ejemplo de esto también se tiene el gas débilmente interactuante dentro de multibarras [12].

Las aplicaciones comerciales de los sistemas donde se presenta la CBE aún no son claras debido a su inestabilidad y costo monetario. Sus aplicaciones a nivel experimental son muy prometedoras para el entendimiento de nuevos fenómenos cuánticos y como una fuente de modelos para simular la materia condensada real [13]. Uno de los fenómenos directamente relacionados con la CBE es la superfluidez. Esta consiste en un estado de la materia que tiene la característica de la ausencia total de viscosidad, esto se da en sistemas que pueden mantener su fase líquida a temperaturas muy cercanas a 0 K. La superfluidez en el helio-4 fue identificada como tal en 1938 por P. Kapitza [14] y, por separado, por J. Allen y M. D. Misener [15] a la temperatura de 2.18 K. Una de las propuestas planteadas para explicar el fenómeno de la superfluidez es aquella de F. London [16] que relacionó la CBE de los átomos de helio con su superfluidez. Hoy en día sabemos que para que un sistema de muchas partículas cuánticas presenten la superfluidez es necesario que las partículas interactúen entre ellas, por lo que un primer acercamiento para entender este fenómeno real es analizar los gases débilmente interactuantes mediante la solución de la correspondiente ecuación de Gross-Pitaevskii.

Por otro lado, pensando en nuevos materiales para aplicaciones tecnológicas sustentables donde se aproveche las propiedades cuánticas a nivel atómico, las expectativas son prometedoras pero aún se requiere de muchos estudios para ver los frutos a nivel tecnológico. Por ejemplo, aunque no se puede asociar estos estudios a materiales clásicos, el análisis de diversos sistemas cuánticos enfocados

en la estructura de éstos y sus aplicaciones si tienen una relación directa con el análisis del supervidrio [17] de Helio-2 en un sustrato amorfo de carbón. Otra de las aplicaciones de los gases cuánticos ultra fríos es el de los chips atómicos [18], donde sus posibles aplicaciones van desde la medición de campos magnéticos, la implementación de acelerómetros en algunos sistemas o la detección de ondas gravitacionales [19, 20, 21].

En esta tesis nos enfocaremos a estudiar las propiedades del estado base de los bosones débilmente interactuantes y no interactuantes, dentro de estructuras periódicas con vacancias, con el fin de descifrar los efectos de las imperfecciones sobre las propiedades del estado base del gas de Bose.

Gases ideales de Bose

En esta sección revisaremos conceptos importantes de los gases de Bose libres interactuantes y no interactuantes, además de algunas propiedades de dichos sistemas.

2.1. Gas ideal de Bose

La descripción del gas ideal de Bose tiene muchas funciones interesantes, en este caso nos enfocaremos en dos, la primera es que funciona como una de las explicaciones más simples de la CBE, y la segunda es que provee la descripción correcta de algunas propiedades del gas de Bose. En 1938 London [22] fue el primero en utilizar los conceptos del gas ideal de Bose para dar una descripción nueva del helio superfluido. Recientemente el valor de la temperatura crítica predicho por el gas ideal de Bose ha ayudado como guía para buscar el régimen en donde se da la CBE en gases atómicos diluidos dentro de trampas armónicas de manera experimental.

Para describir correctamente al gas ideal de Bose utilizaremos la estadística de Bose-Einstein. Utilizando esta estadística podemos escribir el número de ocupación de un estado cuántico no degenerado con energía E_k de la siguiente forma

$$N(E_k) = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta E_k} - 1} \quad (2.1)$$

donde β es $1/k_B T$, la fugacidad z se define como $z = \exp(\mu/k_B T)$, k_B es la constante de Boltzmann y μ es el potencial químico.

Utilizando el límite termodinámico en el cual $N \rightarrow \infty$ y el volumen del sistema $V \rightarrow \infty$ pero la densidad $n = N/V$ se mantiene finita, la energía E_k se convierte en un espectro continuo. Así para un gas ideal homogéneo de Bose la

2. GASES IDEALES DE BOSE

energía de las partículas es

$$E_k = \hbar^2 k^2 / 2m \quad (2.2)$$

con $\hbar = h/2\pi$, h la constante de Planck y m la masa de la partícula. Con estas mismas consideraciones la densidad de número de partículas se escribe como

$$n = n_0 + \frac{1}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) \quad (2.3)$$

donde n es el promedio de la densidad, λ_{dB} es la longitud de onda térmica de Broglie definida como $\lambda_{dB} = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$, con T la temperatura del sistema y $g_\nu(z)$ definida como la función de Bose-Einstein

$$g_\nu(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\nu} \quad (2.4)$$

Es importante remarcar que n_0 es la densidad de partículas en el estado base de energía E_0 , por otro lado el segundo término de la ecuación (2.3) es la densidad de partículas distribuidas en los estados excitados. Nótese que la fugacidad z toma valores entre 0 y 1, si $z \rightarrow 0$ estamos en el límite clásico de altas temperaturas y si $z \rightarrow 1$ nos encontramos en el régimen de degeneración cuántica. De lo anterior podemos extraer una consecuencia interesante, el número de bosones en los estados excitados es finito y su valor es $n_e \leq 1/\lambda_{dB}^3 g_{3/2}(1)$ donde $g_{3/2}(1)$ es la función zeta de Riemann $\zeta(3/2)$.

Pensemos ahora en la existencia de un sistema con un número N de bosones fijos, existe una temperatura T_c para la cual ocurre la siguiente relación

$$n\lambda_0^3 = \zeta(3/2) \quad (2.5)$$

con $\lambda_0 = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T_c}$. Como estamos trabajando con bosones y gracias a la discusión anterior sobre la ocupación de los estados, sabemos que conforme la temperatura del sistema disminuye los bosones en los estados excitados empezarán a llenar el estado base, hasta que el número de partículas del estado base representa una fracción del total de partículas tenemos la CBE. Utilizando la ecuación (2.5) y la definición de λ_0 tenemos

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (2.6)$$

Si $T > T_c$ todas las partículas se encuentran distribuidas en los estados excitados, si $T < T_c$ solo una fracción ocupa los estados excitados y tenemos la fase condensada [23].

El análisis fue realizado en 3 dimensiones, sin embargo siempre es posible extenderlo a d dimensiones, sin tomar en cuenta espín ni interacción entre partículas, la temperatura crítica se expresa [4]

$$T_0 = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(d/2)(2\pi)^d n}{2\pi^{d/2}\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)} \right] \quad (2.7)$$

donde n es N/L^d la densidad de partículas d -dimensional $\Gamma(d/2)$ es la función gamma de argumento $d/2$, s es el exponente de la relación de energía (i.e. la relación de dispersión) $\varepsilon_k = c_s k^s$. La ecuación (2.7) implica que en una dimensión y en dos dimensiones no hay CBE a temperatura crítica diferente de cero para un gas ideal donde $\varepsilon_k = c_2 k^2$ con $c_2 = \hbar^2/2m$. Esto se observa pues la función de Bose $g_{d/s}(1)$ dependiente de d/s diverge para valores de $d/2 \leq 2$.

2.2. Gases de Bose débilmente interactuantes

2.2.1. Gas de Bose débilmente interactuante libre

En el caso en que los bosones son débilmente interactuantes surge un problema al aplicar los métodos tradicionales de perturbación para resolver dicho sistema. Esta cuestión fue resuelta por Bogoliubov en 1947 [24] gracias a esto tenemos los métodos modernos de aproximación, en este capítulo se presentará una discusión sobre este método.

La condición a tener en cuenta en esta aproximación es

$$r_0 \ll d \quad (2.8)$$

donde r_0 es el rango de fuerzas interatómicas y $d = n^{-1/3}$ es la distancia promedio entre las partículas, con $n = N/V$ la densidad del gas que se mantiene constante siempre. Esta condición implica que la distancia entre dos partículas es lo suficientemente larga para utilizar una aproximación asintótica para la función de onda. Con esto en mente uno puede definir un parámetro de dispersión de longitud de onda a_s que caracteriza todos los efectos de interacción de las propiedades físicas del gas. En general este parámetro no tiene ninguna restricción respecto a la distancia promedio entre partículas, pero si se cumple la siguiente condición

$$|a_s| \ll d \quad (2.9)$$

podemos considerar que el gas es débilmente interactuante. Después de esto podemos pasar a escribir el Hamiltoniano del sistema en varias dimensiones en

2. GASES IDEALES DE BOSE

términos de los operadores de campo $\hat{\Psi}$

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{h}_0(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \quad (2.10)$$

con $V(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$ el potencial de dos cuerpos, una cosa a establecer es que por el momento no estamos considerando potenciales externos. Otra consideración es que el gas ocupa un volumen Ω uniforme lo que permite escribir los operadores de la siguiente forma

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (2.11)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \quad (2.12)$$

donde $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ es el operador de aniquilación para una sola partícula con momento \bar{p} y cumple las condiciones de frontera cíclicas usuales, todo el operador representa una superposición lineal de operadores de aniquilación. Sustituyendo (2.11) y (2.12) en (2.10) y recordando que la integral $\int d\mathbf{r}$ es igual al volumen del sistema obtenemos lo siguiente

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2\Omega} \sum V \hat{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{p}_2-\mathbf{q}} \quad (2.13)$$

con \mathbf{q} el momento asociado a la transformación $\mathbf{R} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ y $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ los momentos asociados a \mathbf{r}' y \mathbf{r} respectivamente, además de $V = \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d\mathbf{r}$.

Notemos que V es proporcional a la longitud de dispersión de la primera aproximación de Born [25],

$$a_s = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (2.14)$$

Para nuestras aproximaciones consideraremos el caso donde $\mathbf{q} = 0$, así

$$a_s = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

En el inicio de esta sección se hizo énfasis acerca de a_s y de cómo la física del sistema dependía solo de este parámetro. Siguiendo la ecuación (2.15) y V

$$V = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (2.16)$$

Así el Hamiltoniano resultante será

$$\hat{H} = \sum \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{V}{2\Omega} \sum \hat{a}_{\mathbf{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \quad (2.17)$$

Notemos que la dependencia explícita del potencial de dos cuerpos ya no está presente. El punto crucial de la aproximación utilizada por Bogoliubov es utilizar \hat{a}_0 para reemplazar los operadores de creación y aniquilación

$$\hat{a}_0 = \sqrt{N_0} \quad (2.18)$$

En este punto es necesario aclarar algunas cuestiones; esta sustitución solo puede ser utilizada para potenciales suaves cuyas perturbaciones son pequeñas para cualquier distancia. Ahora recordemos que en un gas ideal a $T = 0$ todos los átomos se encuentran en el condensado y $N_0 = N$. En un gas no ideal los átomos que ocupan estados fuera del base son algunos pocos, por lo que en primera aproximación podemos dejar de tomar en cuenta aquellos términos de (2.17) que contienen los operadores $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ y $\hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger$ con $\mathbf{p} \neq 0$.

Gracias a esto la energía del estado base será [26]

$$E_0 = \frac{N^2 V}{2\Omega} \quad (2.19)$$

Además tomando la aproximación de Born podemos hacer $V = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ con a_s la longitud de dispersión, reescribiendo la energía como

$$E_0 = \frac{1}{2} N g n \quad (2.20)$$

con $n = N/\Omega$ es la densidad del gas y g la definimos como la constante de acoplamiento de interacción para una a_s fija

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (2.21)$$

2.2.2. Ecuación de Gross-Pitaevskii

Ahora vamos a discutir sobre gases diluidos de Bose no uniformes. Esto se hace por dos razones; la primera es que experimentalmente los gases se encuentran de manera natural siendo no uniformes, la segunda razón es que al ser no uniformes se nos presentan nuevos fenómenos de naturaleza cuántica que son interesantes de analizar.

Si empezamos con el Hamiltoniano de muchos cuerpos para la segunda cuantización tenemos lo siguiente

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{h}_0(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \quad (2.22)$$

2. GASES IDEALES DE BOSE

El operador \hat{h}_0 es el Hamiltoniano del gas de Bose no interactuante sujeto a un potencial externo

$$\hat{h}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

Anteriormente mencionamos la importancia de a_s , este valor determina la interacción entre los bosones sin importar la forma del potencial siempre y cuando el valor de la longitud de dispersión sea correcto, así podemos reemplazar $V(\mathbf{r})$ con un potencial efectivo que de el valor correcto de a_s . Esta interacción efectiva tiene la forma de un pseudo-potencial de contacto con la siguiente forma

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.24)$$

con g definida en (2.21). Sustituyendo directamente en (2.22) y utilizando la representación de Heisenberg obtenemos lo siguiente

$$[\hat{H}, \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)] = i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.25)$$

Usando el Hamiltoniano definido en (2.22) y considerando ahora que existen potenciales externos tenemos

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (2.26)$$

Similar a cuando estudiamos el gas homogéneo de Bose, suponemos que una proporción macroscópica de las partículas ocupan el estado base de energía accesible, esto con el fin de introducir g en la ecuación, además si consideramos un potencial efectivo suave donde la aproximación de Born sea aplicable podemos intercambiar el operador $\hat{\Psi}$ por la función de onda Ψ , la última consideración que tomamos es acerca de la función de onda Ψ suponemos que su variación es muy cercana al rango de la fuerza interatómica por lo que podemos sustituir \mathbf{r}' por \mathbf{r} sin ningún problema.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.27)$$

La ecuación (2.27) es conocida como la ecuación de Gross-Pitaevskii, obtenida de manera independiente por Gross [27] y Pitaevskii [28] en 1961, esta ecuación puede ser obtenida también por el método variacional [29]. Recordemos que esta ecuación es válida a temperaturas de $0K$ y describe la dinámica del condensado, dándole un vistazo es posible observar que la ecuación tiene la forma de la ecuación de Schrödinger para una partícula, con un término no lineal adicional, este

término es proporcional al cuadrado de la función de onda y modela las interacciones entre partículas. Podemos escribir el Hamiltoniano de Gross-Pitaevskii como

$$\hat{H}_{GP} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.28)$$

con esto rescribimos (2.27) de la siguiente forma

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_{GP}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.29)$$

Como anteriormente asumimos que la mayor proporción de bosones están en el estado base, podemos asegurar que ocurre lo siguiente

$$n(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.30)$$

y el número total de bosones N es

$$N = \int n(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.31)$$

La ecuación (2.31) es conocida como la condición de normalización. Utilizando la prescripción de Bogoliubov e ignorando las fluctuaciones cuánticas encontramos la energía del condensado

$$E[\Psi] = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r}|\nabla\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int d\mathbf{r}V_{ext}(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} \int d\mathbf{r}|\Psi(\mathbf{r}, t)|^4 \quad (2.32)$$

La ecuación (2.32) con la condición de normalización (2.31) describe las propiedades del estado base de un gas de bose débilmente interactuante. Gracias a la condición de normalización el potencial químico queda fijo por lo que para obtenerlo solo se necesita derivar de la siguiente forma

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S,V} \quad (2.33)$$

Aunque existen otro tipo de mecanismos teóricos, la ecuación de GP es considerada como la principal herramienta teórica que describe fenómenos que ocurren en gases de bosones débilmente interactuantes en temperaturas muy bajas.

2.3. Gas de Bose en cuasi unadimensión.

En las secciones anteriores se ha desarrollado la teoría para gases de Bose en tres dimensiones, sin embargo en la actualidad gracias a las técnicas experimentales existentes es posible lograr que un gas se mueva en dos o una dimensión, esto ocurre con un potencial específico que confina el movimiento espacial.

Consideremos un gas de N bosones confinado en una geometría cilíndrica de longitud L producida con una trampa armónica con frecuencia ω_{\perp} en la sección radial y ω_z en la dirección axial. En este caso la densidad unidimensional n_1 se relaciona con la densidad en tres dimensiones de la siguiente forma

$$n_1 = n\pi a_{\perp}^2 \quad (2.34)$$

donde $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m\omega_{\perp}}$ que es la longitud de oscilación transversal.

Es también importante mencionar que la constante de acoplamiento para interacción g cambia dependiendo de las dimensiones en las que nos encontremos, para tres dimensiones g_{3D} es la referida en (2.21) mientras que en una dimensión la constante se ve de esta forma

$$g_{1D} = \frac{-2\hbar^2}{ma_{1D}} \quad (2.35)$$

Donde $a_{1D} = -a_{\perp}^2/a_s$ [26]. Con esto en mente podemos escribir la ecuación estacionaria del sistema en una dimensión de la siguiente forma

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi(x)|^2 + V_{ext}(x)|\Psi(x)|^2 + \frac{g_{1D}}{2} |\Psi(x)|^4 \right) dx \quad (2.36)$$

Mientras que el potencial químico queda como

$$\mu\Psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{ext}(x) + g_{1D}|\Psi(x)|^2 \right) \Psi(x) \quad (2.37)$$

2.4. Gas de Bose de Lieb-Liniger

El modelo de Lieb-Liniger [30] sirve para hacer la descripción de un gas de bosones con N partículas que interactúan mediante un potencial de contacto repulsivo. Esta teoría se aplica cuando la densidad se vuelve muy pequeña $n_{1D}a_s^2/a \gg 1$ y aparecen efectos más allá de la teoría de campo medio. Lo primero para hablar de este sistema es describir el Hamiltoniano.

$$\hat{H}_{LL} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + g_{1D} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \delta(z_i - z_j) \quad (2.38)$$

Este Hamiltoniano puede ser diagonalizado con exactitud utilizando el ansatz de Bethe [31], con esto obtenemos una ecuación de estado por el gas. A temperatura cero la energía por partícula puede ser escrita como

$$E(n_1)/N = \frac{\hbar^2}{2m} n_1^2 e(\gamma(n_1)) \quad (2.39)$$

donde

$$\gamma = \frac{m g_{1D}}{\hbar^2 n_1} \quad (2.40)$$

y

$$e(\gamma) = \frac{\gamma^3}{\lambda^3(\gamma)} \int_{-1}^{+1} g(x, \gamma) x^2 dx \quad (2.41)$$

puede entenderse como la energía por partícula del sistema. Donde las funciones $\lambda^3(\gamma)$ y $g(x, \gamma)$ están determinadas por las ecuaciones

$$g(x, \gamma) - \frac{1}{2\pi} = \frac{\lambda(\gamma)}{\pi} \int_{-1}^{+1} \frac{g(x', \gamma)}{\lambda^2(\gamma) + (x - x')^2} dx' \quad (2.42)$$

$$\lambda(\gamma) = \gamma \int_{-1}^{+1} g(x, \gamma) dx \quad (2.43)$$

La forma de resolver estas ecuaciones numéricamente puede verse en [12]. Con la información de la energía por partícula es fácil calcular el potencial químico con la siguiente derivada $\mu = \partial(n_1 E(n_1))/\partial n_1$. Una parte importante que le da consistencia a este resultado es que para altas densidades, es decir, $\gamma \ll 1$ recuperamos el límite $n_{1D} a_{\perp}^2 / a_s \gg 1$ donde la teoría de campo medio es válida.

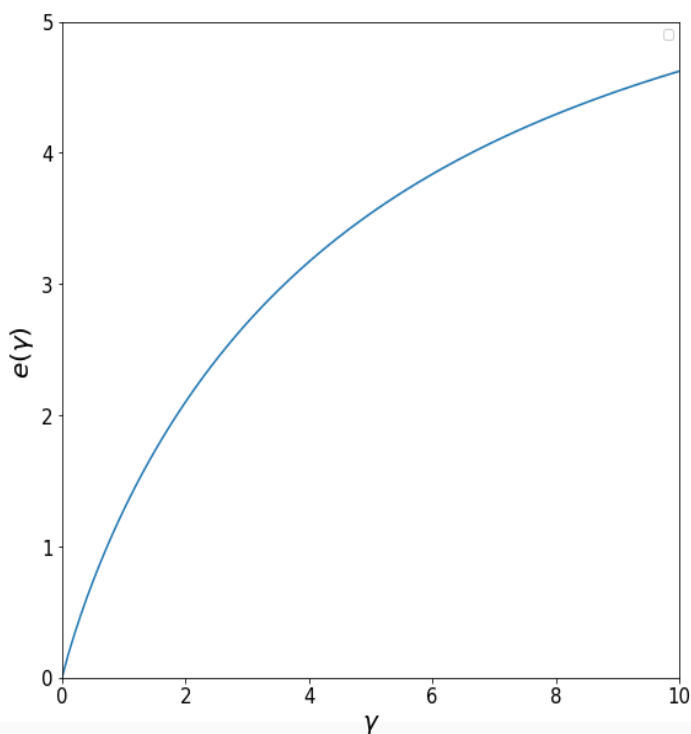


Figura 2.1: Figura de $e(\gamma)$ con $\gamma = 2/n_1 a_{1D}$, las unidades de energía son $\hbar^2/2ma^2$

Gas de Bose en cristales perfectos e imperfectos

3.1. Cristales perfectos e imperfectos

Para los sistemas a estudiar en esta tesis se utilizó un potencial un potencial Peine de Dirac que es un caso particular del del potencial Kronig-Penney con imperfecciones. Un cristal es un material sólido cuyos constituyentes microscópicos (que puede ser átomos, moléculas o iones) están ordenados formando una estructura cristalina que se extiende en todas las direcciones posibles manteniendo la simetría. Un cristal imperfecto entonces es aquél en el cual la simetría traslacional es interrumpida en alguno de sus puntos. Para poder discutir el peine de Dirac de manera apropiada describiremos el modelo de Kronig-Penney [32], en principio el modelo del Kronig-Penney puede ser visto como un cristal perfecto pues en una dimensión consta de barreras de anchura b y de altura V_0 , estas barreras se encuentran separadas a una distancia a entre ellas donde el valor del potencial es 0 (pozos), el periodo del potencial es $a + b$. Matemáticamente puede ser escrito de la siguiente forma

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Theta[x - (a + (n - 1)(a + b))] \Theta[-x + n(a + b)] \quad (3.1)$$

donde Θ es la función escalón de Heaviside. El peine de Dirac ocurre en el límite en el cual la anchura de las barreras se hace 0 y la altura del potencial tiende a infinito pero manteniendo la cantidad $V_0 b$ constante e igual a v_0 que es la intensidad de la delta con dimensión de energía por longitud.

Esto permite obtener un modelo que dada la descripción de un cristal se asemeja a éste pues genera una estructura periódica (i.e. una estructura cristalina). Estas barreras se encuentran ahora colocadas a una distancia a entre ellas como

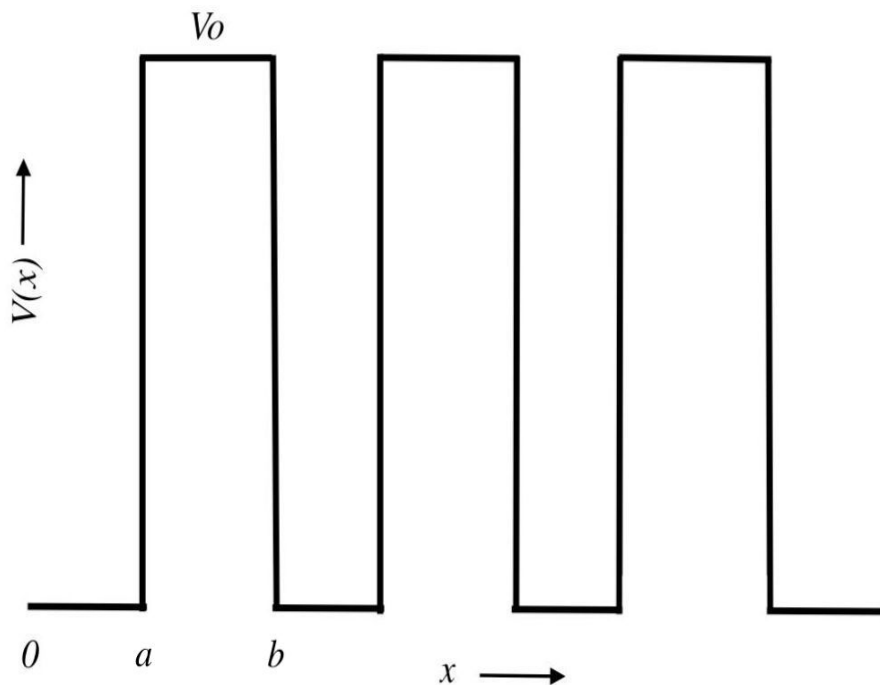


Figura 3.1: Potencial de Kronig-Penney.

puede ser observado en la figura 3.2. El periodo del nuevo potencial Peine de Dirac se ve modificado siendo únicamente a situando cada delta en la posición na con n cualquier número entero. Matemáticamente podemos describir el Peine de Dirac de la siguiente manera

$$V(x) = v_0 \delta(x - na) \quad (3.2)$$

Para generar las vacancias dentro del cristal se remueve una delta situada en la posición na para convertirlo en un cristal con una imperfección, la manera de quitársela en este caso será tan sencillo como sumar un potencial que tenga el mismo valor v_0 de la delta levantada pero con un signo negativo neutralizando así una delta. La idea se puede aplicar a cuantos potenciales delta se requieran remover.

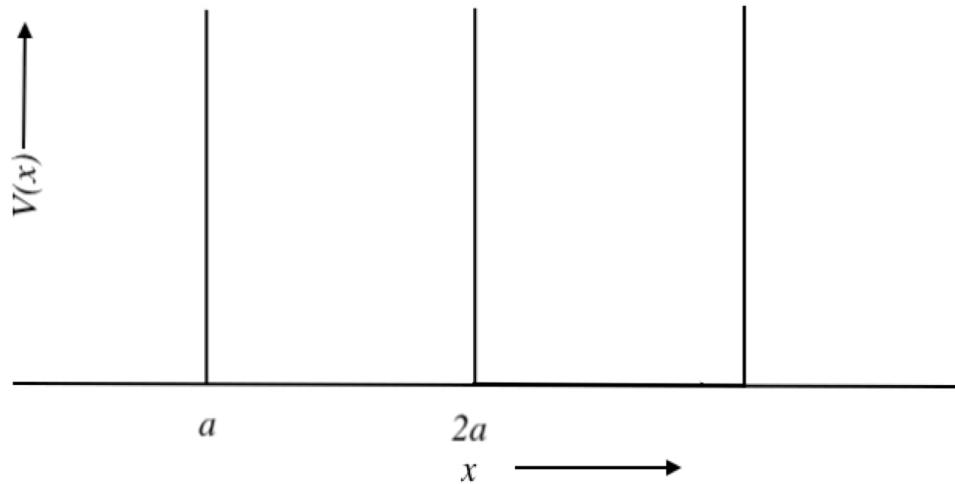


Figura 3.2: Potencial Peine de Dirac.

3.1.1. Gas de Bose ideal dentro de cristales perfectos e imperfectos

3.1.1.1. Espectros de energía

Para el caso en donde este cristal es infinito y perfecto tenemos la siguiente ecuación

$$P \frac{\text{sen}(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ak) \quad (3.3)$$

Se define a $\alpha^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$ con ε la energía del sistema, mientras que $P = mav_0/\hbar^2$ es la intensidad de la delta y k el número de onda. Analicemos esta ecuación gráficamente para encontrar las soluciones. El lado izquierdo de la ecuación solo depende implícitamente de estos valores de P y αa así entonces tenemos una ecuación de la siguiente forma

$$f(P, \alpha a) = \cos(ak) \quad (3.4)$$

Como los valores del coseno están acotados entre 1 y -1 entonces la función $f(P, \alpha a)$ sólo tiene soluciones entre esos valores, como se muestra en la figura 3.3.

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES PERFECTOS E IMPERFECTOS

Observando y haciendo un análisis sobre la gráfica mostrada en la figura 3.3 se

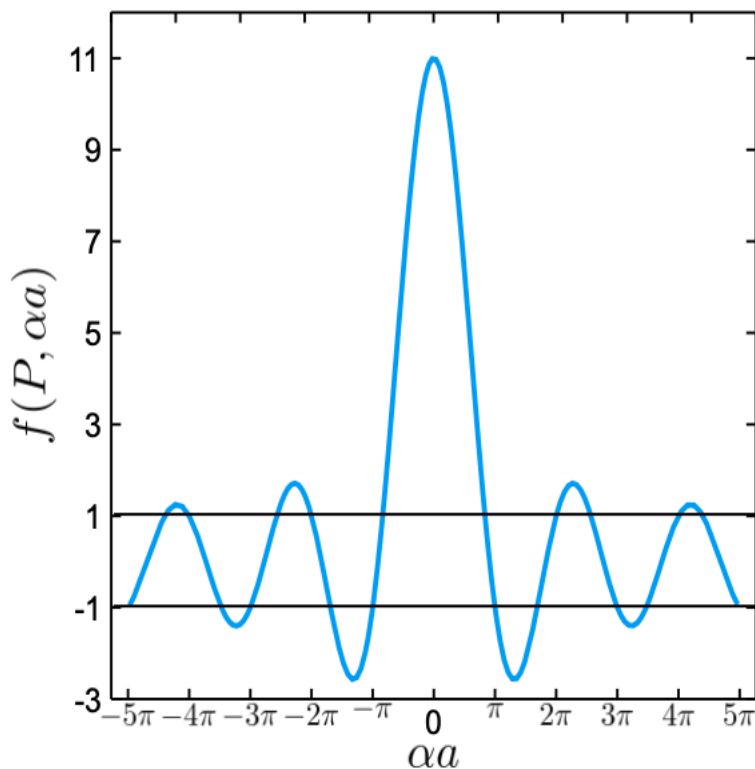


Figura 3.3: Gráfica de $f(P, \alpha)$ vs. αa con $P_0 = 10$

puede concluir que dadas una P y αa el espectro de energía para los bosones no interactuantes está formado por dos tipos de regiones que están conformadas por bandas de energía y regiones inaccesibles o prohibidas de energía, estas últimas regiones son todos los valores que están por fuera de los valores del intervalo $[-1,1]$. Notemos que el ancho de las bandas permitidas depende directamente del término αa este crecimiento en el ancho de las bandas se debe a que el término $P/\alpha a$ tiende a 0.

En la Figura 3.4 se muestran las bandas de energía de un cristal formado por 101 deltas sin vacancias, es posible recuperar la energía asociada a la caja de potencial cuando $P \rightarrow \infty$ pues las bandas permitidas se adelgazan hasta convertirse en niveles de energía. Esto pasa pues la ecuación (3.3) solo tiene solución si $\text{sen}(\alpha a) = 0$ i.e $\alpha a = n\pi$ con n entero.

En el caso en el que se tenga el mismo cristal pero en un espacio finito la

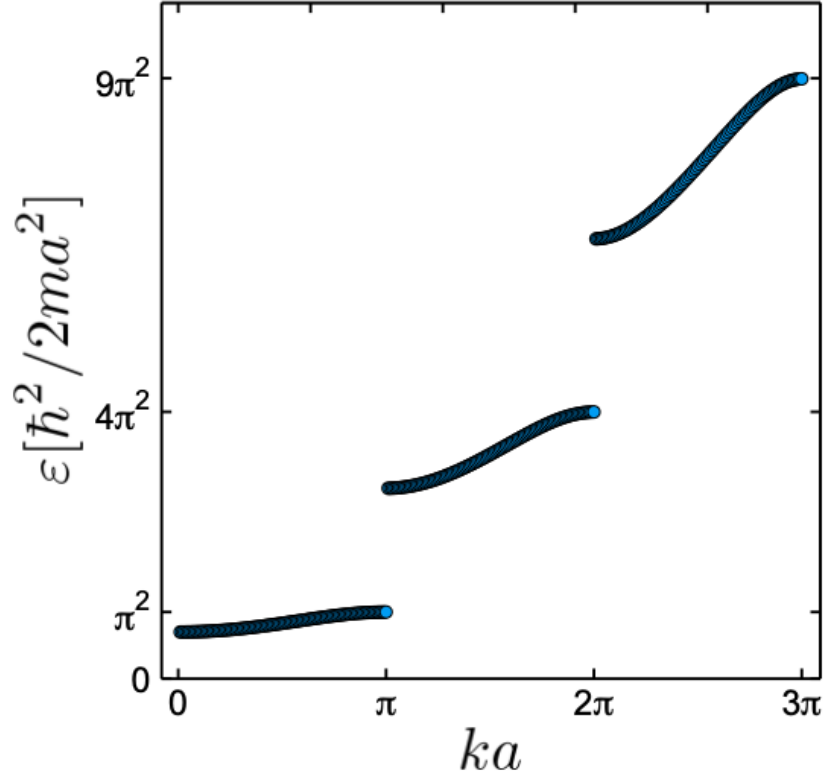


Figura 3.4: Bandas de energías obtenidas al resolver el sistema de KP con el potencial peine de Dirac formado por 101 deltas sin vacancias, $P_0 = 10$

ecuación que se obtiene es [7]

$$\frac{P}{\alpha a} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos\left(\frac{n\pi}{M+1}\right) \quad ; n \in \mathbb{N} \quad (3.5)$$

Donde M es el número total de deltas en el modelo. Cuando $P \rightarrow 0$ recuperamos los niveles de energía de una caja de ancho $(M+1)a$

Si el cristal a modelar es infinito con la delta central diferente a todas las demás la ecuación que da el espectro de energías es [7]

$$(\alpha a) \cot(\alpha a) = \frac{(\alpha a)^2 + P'^2}{2P} - P' \quad (3.6)$$

con $P' = mv'_0$ donde v'_0 es la intensidad de la delta que es diferente a todas las demás. Si el cristal es finito con una delta diferente entre M_1 deltas iguales a la izquierda y M_2 deltas iguales a la derecha, siendo $M = M_1 + M_2 + 1$ el

3. GAS DE BOSE EN CRISTALES PERFECTOS E IMPERFECTOS

número total de deltas, el espectro de energías se obtiene de la siguiente ecuación trascendental [7]

$$\text{sen}[(M_1 + M_2)\theta] = 2\xi'\text{sen}[(M_1 + M_2 + 1)\theta] + 2(\xi' - \xi) \frac{\text{sen}(M_1\theta)\text{sen}(M_2\theta)}{\text{sen}(\theta)} \quad (3.7)$$

donde $\xi = \cos(\theta)$, además ξ y ξ' satisfacen $\xi = \cos(\alpha a) + P\text{sen}(\alpha a)/\alpha a = \cos(\theta)$, $\xi' = \cos(\alpha a) + P'\text{sen}(\alpha a)/\alpha a = \cos(\theta)$ y $(\alpha a)^2 = 2ma^2E/\hbar^2$

Una consecuencia de remover deltas del cristal para volverlo imperfecto es la aparición de nuevas bandas de energía en la región prohibida del caso perfecto como es posible observar en la figura 3.5, al llevarlo al límite en el que se retiran todas las deltas se recupera el espectro de energías asociado a la partícula libre. Para ver a detalle la explicación y la deducción analítica de la aparición de estas bandas se puede revisar [7]

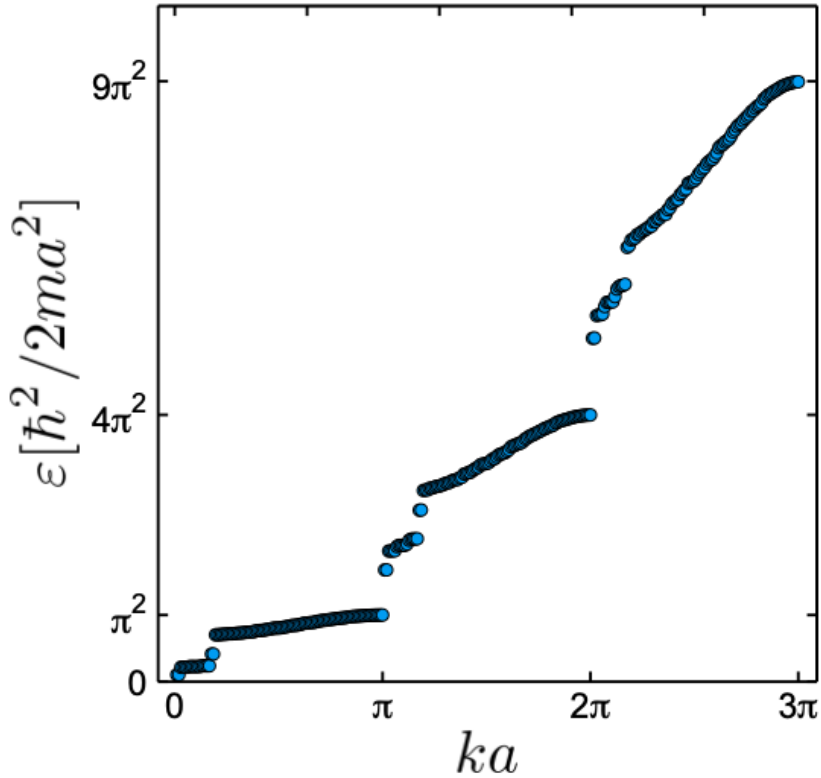


Figura 3.5: Bandas de energías obtenidas al resolver el sistema de KP con el potencial peine de Dirac formado por 101 deltas con 20 vacancias aleatorias $P_0 = 10$

Gases débilmente interactuantes dentro de cristales

4.1. Gas de Bose con interacciones

La ecuación de GP se ha resuelto para muchos sistemas, tales como solitones en una, dos o tres dimensiones [34, 35, 36] e incluso para funciones de onda de Bloch [37, 38, 39], en esta sección se hará un breve resumen para un gas de Bose unidimensional débilmente interactuante atrapado en multi-tubos [12].

La ecuación para los estados estacionarios en este caso es

$$\hat{\mathbf{H}}(x)\Psi_{1D}(x) = \mu_{1D}\Psi_{1D}(x) \quad (4.1)$$

Con el Hamiltoniano para una sola partícula en la coordenada x se define como

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{KP}(x) + g_{1D}|\Psi(x)|^2 \quad (4.2)$$

con m la masa de la partícula y V_{KP} el potencial de Kronig-Penney.

Se puede encontrar que la energía del sistema se encuentra descrita por la siguiente ecuación

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left(|(-i\partial_x + k)\Phi_k(x)|^2 \right) dx + \int \left(V_{ext}(x)|\Phi_k(x)|^2 + \frac{g_{1D}}{2}|\Phi_k(x)|^4 \right) dx \quad (4.3)$$

donde $\Phi_k(x)$ son las soluciones en forma de los estados de Bloch y k los cuasimomentos. El potencial químico por otra parte queda descrito como

$$\mu_{1D} = \frac{E}{N} + \frac{g_{1D}}{2N} \int n_1^2(x) dx \quad (4.4)$$

Donde N es el promedio de bosones en el condensado sobre una longitud igual al periodo del potencial y n_1 es la densidad lineal.

Debido a que se solucionarán la ecuación de Schrödinger y la ecuación de Gross-Pitaevskii se utilizaron dos métodos numéricos distintos para obtener los resultados de la energía del estado base, los métodos se enfocaron en cada una de las ecuaciones antes mencionadas. Para el caso en el que el gas de bosones es ideal se utilizó el método de diferencias finitas, mientras que en el caso donde el gas de bosones es interactuante se utilizó el método de tiempo imaginario. Gracias a la naturaleza de los métodos el potencial de deltas se modeló de la misma forma en ambos casos.

4.2. Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas es un método numérico para resolver ecuaciones diferenciales discretizando las derivadas de los términos involucrados en la ecuación diferencial cambiándolos por cocientes diferenciales. Este método convierte una ecuación diferencial ordinaria o parcial que puede ser lineal o no, en un sistema de ecuaciones similares algebraicas. El sistema obtenido después de la discretización puede ser resuelto por métodos algebraicos. Tomemos cualquier función $u(x)$ y aproximémosla por el teorema de Taylor de la siguiente manera:

$$u(x+h) \approx u(x) + u'(x)h + \frac{h^2}{2}u''(x+h) \quad (4.5)$$

Es conveniente utilizar los dos primeros términos del desarrollo (4.5). El tercer término del orden $O(h^2)$ determina que el error de la aproximación es proporcional a h^2 , así la ecuación (4.5) queda aproximada de la siguiente manera

$$u(x+h) \approx u(x) + u'(x)h + O(h^2) \quad (4.6)$$

Por lo anterior es posible despreciar el término del error para una h suficientemente pequeña y la aproximación de la primera derivada es:

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \quad (4.7)$$

Siguiendo este proceso es posible aproximar la segunda derivada como:

$$u''(x) \approx \frac{u(x+2h) - 2u(x+h) + u(x)}{h^2} \quad (4.8)$$

gracias a estas aproximaciones podemos utilizar la representación matricial y resolver el problema algebraico que obtendremos.

Así el problema se reduce a encontrar los eigenvalores del sistema generado por la matriz que se obtuvo al discretizar la ecuación de Schrödinger (4.9) debido a que estos en una matriz de rxr nos darán los primeros r valores de E para un potencial V previamente establecido.

4.3. Método de tiempo imaginario

Para encontrar el estado base de energía del sistema tomamos una variación del método conocido como Gradient Flow with Discrete Normalization (GDFN) [33], ésta consiste en tomar una sucesión de tiempo imaginario $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_n$ y una partición del sistema de longitud L , en esta partición las transformadas de Fourier discretas pueden ser resueltas de manera eficiente, esta partición la denotamos por los puntos x_j . Para continuar lo que se necesita es utilizar el siguiente GDFN [33] esto con el fin de obtener el estado base del sistema

$$\phi_t = \frac{1}{2} \frac{\delta E(\phi)}{\delta \phi} = \frac{1}{2} \nabla^2 \phi - V(x)\phi - \beta |\phi|^2 \phi \quad (4.12)$$

Aplicando la aproximación a nuestra ecuación de GP tenemos a energía del estado base de la siguiente forma

$$E(\phi(x_j, t_n)) \approx E^n = \frac{b-a}{4} \sum_{l=1}^{M-1} \mu_l^2 |(\tilde{\phi}^n)|^2 + h \sum_{j=0}^{M-1} [V(x_j) |\phi_j^n|^2 + \frac{\beta}{2} |\phi_j^n|^4] \quad (4.13)$$

Donde L es la longitud de la partición espacial, M el número de puntos de la red, h la separación entre esos puntos, ϕ función de onda el espacio físico, $\tilde{\phi}$ su transformada de Fourier discreta y $\mu_l = \pi l/L$

Aplicando lo mismo al potencial químico descrito en (2.37) tenemos

$$\mu(\phi(x_j, t_n)) \approx \mu^n = E^n + h \sum_{j=0}^{M-1} \frac{g}{2} |\phi_j^n|^4 \quad (4.14)$$

Es importante hacer una pausa para explicar que la notación $\phi(z_j, t_n) = \phi_j^n$. Notemos que el potencial externo $V(x_j)$ solo depende de la partición espacial, así que para modelar el Peine de Dirac se levantó un solo punto de la partición, manteniendo siempre el área del rectángulo debajo constante, en la siguiente sección se explicara de manera más detallada este procedimiento.

4.4. Modelado del Potencial Peine de Dirac

En el caso planteado en esta tesis el potencial es el peine de Dirac con un número finito de imperfecciones. Cada delta la generamos levantando a una altura V_0 un sólo punto en la posición de la delta. La razón por la que es posible tomar esta aproximación es que resulta ser equivalente a levantar algunos puntos aledaños entre si, siempre y cuando el área del rectángulo formado por estos puntos se mantenga constante (en este caso se tomo el área como 1). Como es posible imaginar la anchura irá decreciendo conforme estos puntos estén cada vez más juntos, mientras que su altura (V_0) irá aumentando. Para mayor precisión se necesitará una partición suficientemente refinada lo que en ambos programas significa agregar más puntos x_j

Recapitulando, levantar puntos aledaños requiere mejorar la partición lo cual implica añadir puntos x_j más cercanos entre si, que por último se traduce en tiempo de cómputo. Para evitar elevar el tiempo de cómputo optamos por la siguiente solución, levantamos un sólo punto pues lo que esta pasando es que este rectángulo imaginario tiene sus paredes entre el punto levantado y los vecinos inmediatos, manteniendo por supuesto el área igual a 1. Para ejemplificar el procedimiento de la definición de nuestra delta mostramos la figura 4.1.

Es necesario aclarar que cuando se levanta sólo un punto existe una incertidumbre asociada al área del rectángulo pues ocurre que las paredes del rectángulo caen entre el punto levantado y su primeros vecinos como es observado en la figura 4.2.

Como es posible notar esta incertidumbre se va reduciendo cuando la distancia h decrece, por lo que es importante tener una buena partición que depende directamente del número de deltas que se quieran poner en el sistema.

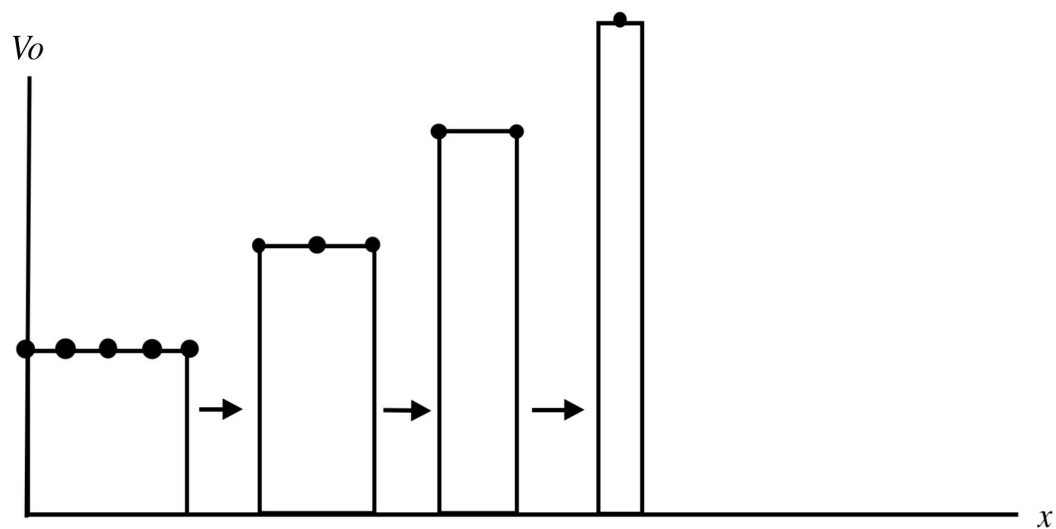


Figura 4.1: Evolución de la forma en que se toma la partición del espacio para llegar a levantar un punto. Se respeta que el área de los rectángulos es 1

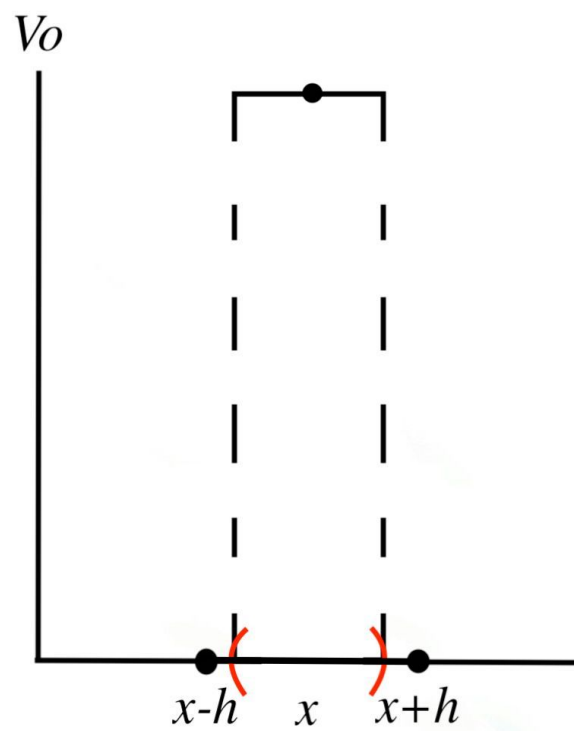


Figura 4.2: Rectángulo formado por un sólo punto, las paredes están entre x y $x \pm h$

Propiedades del estado base del gas de bose débilmente interactuante

Es importante recalcar que todas las energías reportadas en este análisis tiene la unidad de $\hbar^2/2ma^2$, la incertidumbre en los casos que se hizo estadística se dio el valor como bueno cuando el error asociado fue menor del 2%.

Existieron 2 tipos de variaciones de los sistemas que se analizaron, primero se varió una sola de las deltas de un sistema con y sin interacciones, el número de deltas totales fueron 12 y la variación se dio para conocer como el tamaño de la delta afectaba la energía del estado base.

En el sistema con interacciones se realizaron tres casos distintos para el valor de la interacción, estos fueron $g = 0.5, 1$ y 2 , se fue variando la altura de una sola delta de las 12 que conforman el total del sistema, la variación se dio desde el tamaño original de las deltas ($P_0 = 10$) hasta la desaparición total de esta ($P_0 = 0$), los resultados se pueden ver en la tabla 5.1 y en la figura 5.1

A continuación se removieron 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de deltas al azar de sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales para $g=0, 1$ y 2 , de nuevo se obtuvo la energía del estado base, el potencial químico y las funciones de onda, en este caso se hizo estadística pues las localizaciones de las deltas no tenían por que ser las mismas y por lo tanto la energía del estado base tenía ciertas variaciones, se dejó de hacer tiradas cuando el error porcentual fuera menor al 2%. Estos datos se muestran en las figuras 5.2 5.3 5.9 mientras que los valores exactos se muestran en las tablas 5.2, 5.3 y 5.4 respectivamente.

Por último se reportan los valores de la energía del estado base y del potencial químico para diferentes sistemas.

5.0.1. Variación de la delta central del sistema hasta crear una vacancia

En este caso utilizo un sistema de 12 deltas con la misma separación entre ellas, las condiciones de frontera fueron periódicas y la densidad de partículas entre cada delta se mantuvo constante. Todas las deltas del sistema contaban con una altura de $P = 10$ la central se removió en un inicio y se fue haciendo más intensa hasta llegar al valor en el cual el sistema era perfecto. Se escogió el valor de $P = 10$ debido a que anteriormente [10] ya se había analizado el caso sin interacciones y así se puede generar una buena comparación.

$P_0 \backslash g$	0	0.5	1	2
0	2.237	5.524	6.721	8.253
1	3.778	6.324	7.230	8.608
2	4.792	6.770	7.539	8.842
3	5.477	7.039	7.732	8.998
4	5.953	7.199	7.857	9.106
5	6.280	7.302	7.943	9.183
6	6.525	7.371	8.004	9.241
7	6.688	7.420	8.043	9.280
8	6.793	7.456	8.083	9.319
9	6.847	7.483	8.109	9.347
10	6.872	7.504	8.131	9.369

Tabla 5.1: Energía del estado base para diferentes valores de la delta central y diferentes valores de la interacción, el sistema contaba con 12 deltas totales.

Podemos notar en la tabla 5.1 que conforme crece intensidad de la interacción entre las partículas la aparición de la delta central del sistema afecta cada vez menos, es decir existe un punto en que la interacción entre las partículas se vuelve más importante para la energía que el sistema sea perfecto o presente vacancias.

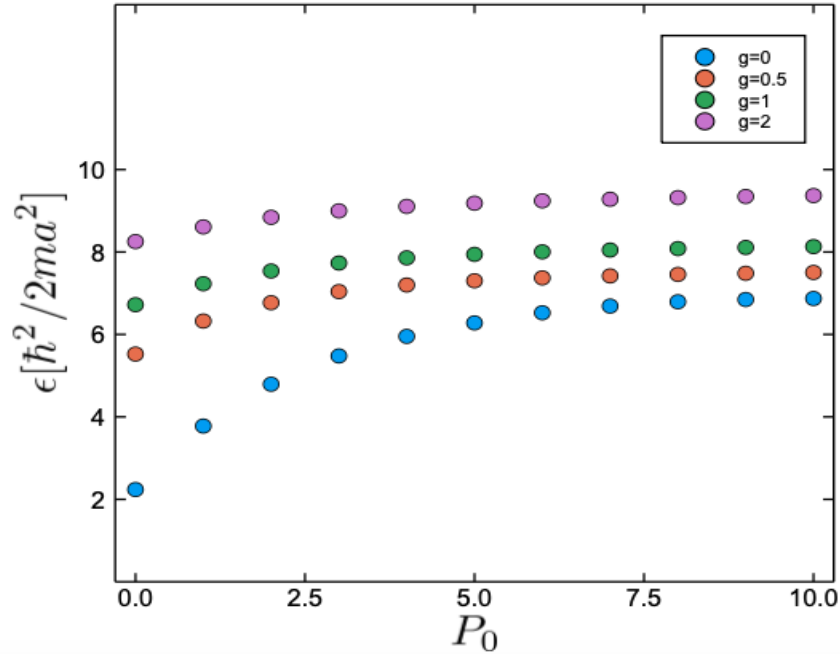


Figura 5.1: Energía del estado base para un sistema de 12 deltas totales, en una de ellas se hizo una variación, estos sistemas contaban con y sin interacciones entre partículas, los casos con interacción son tres, $g = 0.5, 1, 2$, en todos los casos se varió una delta para analizar la evolución de la energía del estado base.

5.0.2. Variación de una fracción de vacancias

En este caso se analizaron 4 sistemas diferentes en cuanto a tamaño total de deltas, fueron de 50, 100, 500 y 1000, a estos sistemas se les removió un porcentaje de deltas al azar, se mantuvo la densidad de partículas entre deltas constante y la distancia entre ellas en el sistema perfecto es igual para todas las deltas, calculamos el estado base de energía para 3 valores distintos de la interacción entre partículas. Las condiciones de frontera permanecen periódicas en todos los casos.

5. PROPIEDADES DEL ESTADO BASE DEL GAS DE BOSE DÉBILMENTE INTERACTUANTE

% removidas	deltas totales			
	50	100	500	1000
0	6.8942	6.8942	6.8942	6.8942
10	1.8338	1.2496	1.0210	0.7638
20	1.0511	0.5320	0.4836	0.3943
30	0.6741	0.4841	0.2827	0.2591
40	0.3987	0.3224	0.2187	0.1508
50	0.2343	0.2307	0.1332	0.1056
100	0	0	0	0

Tabla 5.2: Valores de la energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 % y 50 %, $P_0 = 10$ y $g=0$.

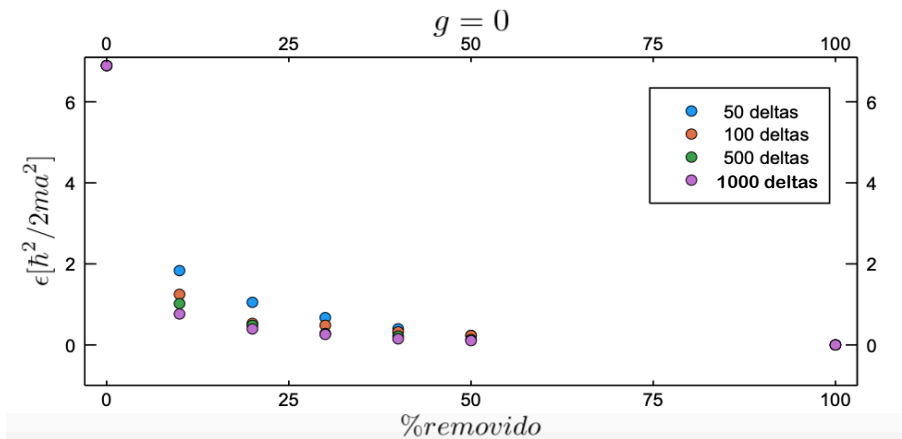


Figura 5.2: Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 %, 50 % y 100 %, $P_0 = 10$ y $g = 0$.

Notamos que para el caso referido en la tabla 5.2 y la figura 5.2 la energía cambia más drásticamente cuando el sistema es más grande, esto se ve desde que se remueven 10% del total de deltas, también ocurre que cuando se remueven todas las deltas del sistema la energía del estado base tiende a cero, esto es lo esperado en un sistema con condiciones de frontera periódicas.

% removidas	deltas totales			
	50	100	500	1000
0	8.1543	8.1543	8.1543	8.1543
10	6.4482	6.4598	6.4577	6.4637
20	5.1183	5.1084	5.0901	5.0623
30	4.0520	4.0264	4.0252	4.0268
40	3.3315	3.3395	3.2895	3.2562
50	2.7428	2.7335	2.7460	2.7332
100	0.9999	0.9999	0.9999	0.9999

Tabla 5.3: Valores de la energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10%, 20%, 30%, 40%, 50% y 100% $P_0 = 10$ y $g=1$.

Para el caso referido en la tabla 5.3 y figura 5.3 el sistema tiene las interacciones entre partículas participando, podemos notar que la aparición de la interacción hace que el tamaño del sistema afecte menos en el valor de la energía del estado base variando solo en la segunda cifra significativa. De nuevo el valor al que tiende la energía del estado base cuando se remueven las deltas es al valor de la interacción, lo cual tiene sentido pues cuando el sistema está lleno de vacancias lo única energía reflejada será la de la interacción.

5. PROPIEDADES DEL ESTADO BASE DEL GAS DE BOSE DÉBILMENTE INTERACTUANTE

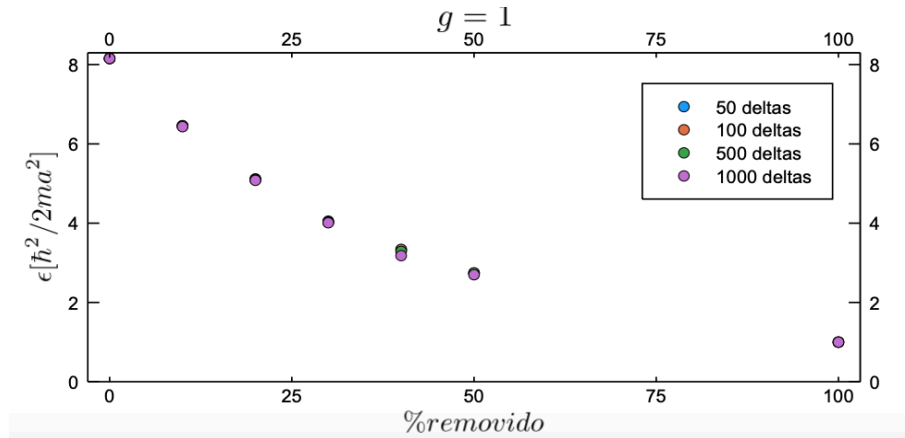


Figura 5.3: Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 % y 50 %, $P_0 = 10$ y $g=1$.

% removidas	deltas totales			
	50	100	500	1000
0	9.3942	9.3942	9.3942	9.3942
10	8.0428	8.0521	8.0520	8.0542
20	6.8778	6.8913	6.8900	6.8881
30	5.8778	5.8987	5.8852	5.8832
40	5.0747	5.0327	5.03915	5.03910
50	4.3194	4.3252	4.3156	4.3292
100	2	2	2	2

Tabla 5.4: Valores de la energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 %, 50 % y 100 %, $P_0 = 10$ y $g=2$.

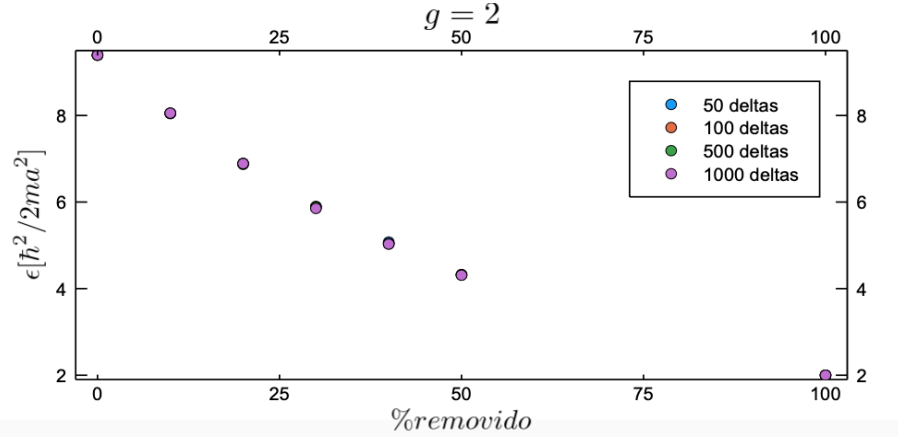


Figura 5.4: Energía del estado base para sistemas con 50, 100, 500 y 1000 deltas totales en donde se removieron 10 %, 20 %, 30 %, 40 % y 50 %, $P_0 = 10$ y $g = 2$.

Para el caso referido en la tabla 5.4 y figura 5.4 el sistema tiene las interacciones entre partículas participando con aún más intensidad, en este último caso las deltas aportan mucha menos importancia en el valor de la energía del estado base comparada con la interacción entre las partículas. De nuevo el valor al que tiende la energía del estado base cuando se remueven las deltas es al valor de la interacción.

5.0.3. Densidad de probabilidad del estado Base

Aquí se muestran la densidad de probabilidad obtenida para los sistemas cuando es removida una delta para diferentes valores de g

5. PROPIEDADES DEL ESTADO BASE DEL GAS DE BOSE DÉBILMENTE INTERACTUANTE

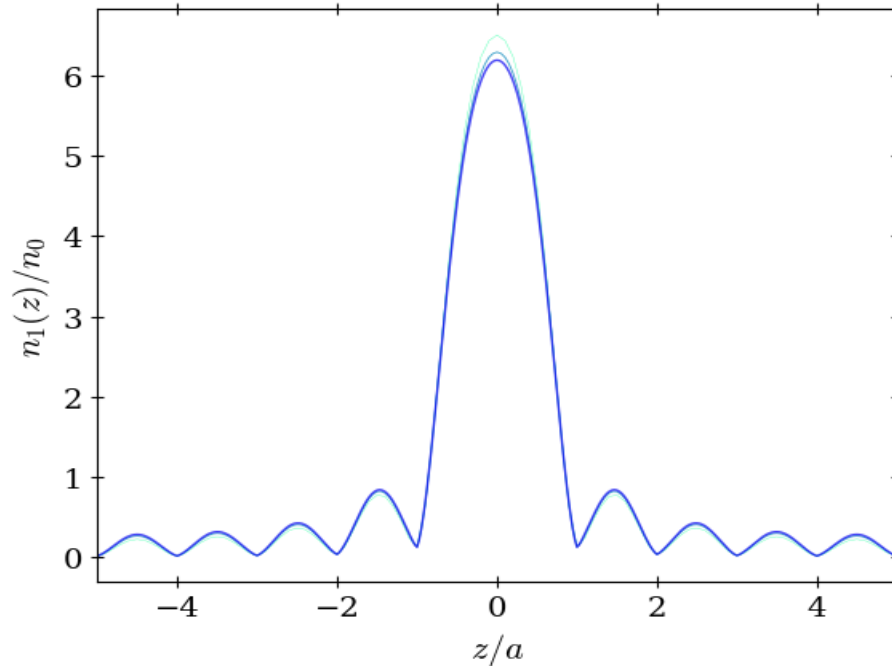


Figura 5.5: Densidad de probabilidad de un sistema con 10 deltas iniciales, posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 0.5$.

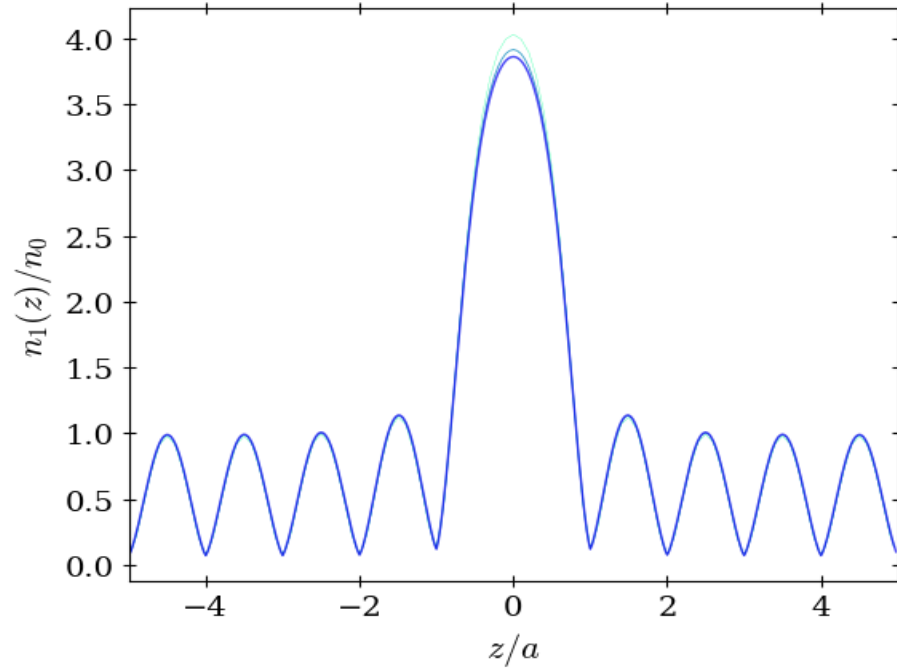


Figura 5.6: Densidad de probabilidad de un sistema con 10 deltas iniciales, posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 1$.

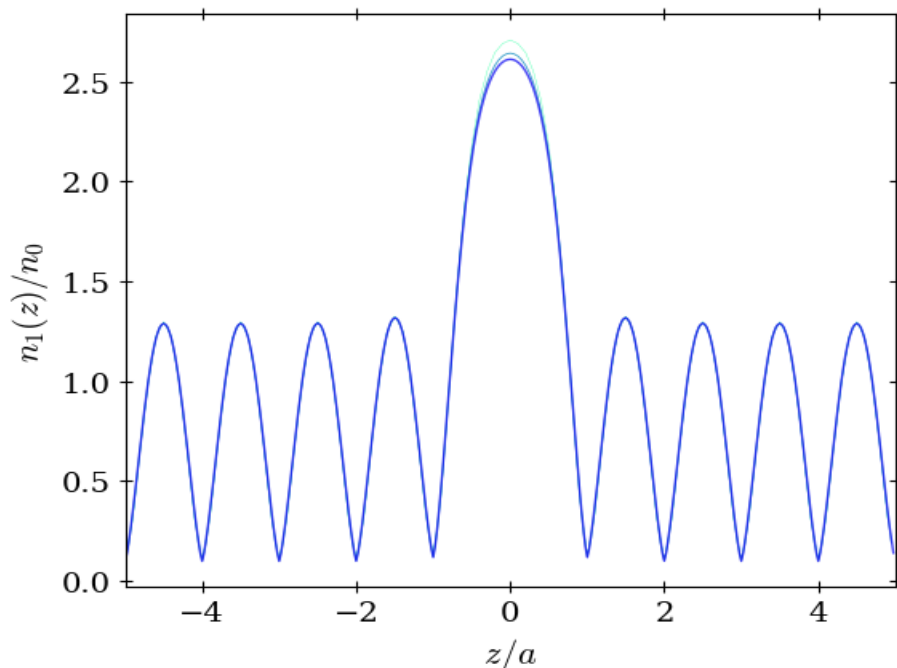


Figura 5.7: Densidad de probabilidad un sistema 10 deltas iniciales posteriormente se removió una delta completamente, el valor de $g = 2$.

Podemos observar que mientras crece g la localización de la función de onda empieza a desaparecer, está es la tendencia que seguimos esperando hasta que las interacciones sean mucho más fuertes que el potencial del sistema.

5.0.4. Brecha

Gracias al análisis hecho para el sistema sin interacción, sabemos que el valor del primer estado excitado para el sistema con una delta removida es el del estado base del sistema con todas las deltas perfectas, en este sentido podemos calcular la brecha existente entre éstas dos energías, a continuación se reportan los datos obtenidos para el sistema con 12 deltas totales.

g	0	0.5	1	2
Brecha	4.635	1.980	1.410	1.116

Tabla 5.5: Salto de energía entre el estado base y el primer estado excitado

Se puede observar que mientras más crezca el valor de la interacción entre las partículas la brecha entre el estado base y el primer estado excitado decrece, esto coincide con el análisis hecho a las funciones.

5.0.5. Regresión al infinito

Para un sistema con una interacción de $g = 1$ en el cual se hizo crecer el número de deltas hasta llegar a mil de ellas partiendo de 10 encontramos que la energía en el infinito tiene el valor de $8.7241 \hbar^2/2ma^2$, el ajuste del tipo exponencial nace de conocer la energía para estos mismos sistemas sin interacciones, esto nos da el fundamento físico para creer que en sistemas con interacción el comportamiento debería seguir la misma tendencia.

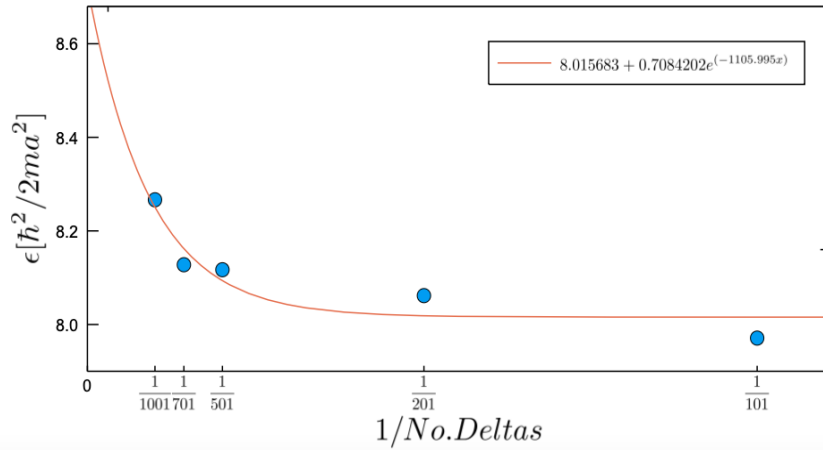


Figura 5.8: Extrapolación de la energía del estado base cuando el longitud del sistema tiende a infinito. Encontramos que el valor es de $8.7241 \hbar^2/2ma^2$ para $P_0 = 10$ y $g = 1$.

Esta extrapolación nos está mostrando que la energía del estado base crece de manera exponencial cuando la longitud del sistema tiende a infinito, manteniendo la densidad constante y nos da un primer acercamiento a su comportamiento.

5.0.6. Energía del estado base y potencial químico para diferentes sistemas

$E \backslash g$	0	0.1	0.5	1	2
Libre	0	0.1	0.5	0.999	2.000
Perfecto	6.894	7.021	7.5	8.154	9.394
Una delta removida	2.238	6.925	7.499	8.135	9.379
Dos deltas removidas	2.238	6.829	7.472	8.117	9.365
Una delta removida (regresión)	2.238	7.134	7.983	8.742	10.325

Tabla 5.6: Valores de la energía del estado base para diferentes sistemas, 1001 deltas iniciales para los todos los sistemas excepto en la regresión al infinito. $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$

$\mu \backslash g$	0	0.1	0.5	1	2
Libre	0	0.2	1.0	2.0	4.0
Perfecto	6.894	7.272	8.282	9.544	12.170
Una delta removida	2.238	7.230	8.272	9.534	12.150
Dos deltas removidas	2.238	7.210	8.266	9.522	11.992
Una delta removida (regresión)	2.238	7.673	8.529	9.870	13.928

Tabla 5.7: Valores del potencial químico para diferentes sistemas, 1001 deltas iniciales para los todos los sistemas excepto en la regresión al infinito. $P_0 = 10$ y $a_0 = 1$

Los valores mostrados en la tabla 5.7 nos dicen que el potencial químico para el caso cuando las interacciones entre partículas son diferentes de cero es mayor que la energía del estado base, esto difiere de lo reportado anteriormente pues se sabe que cuando $g = 0$ el potencial químico es menor o igual que la energía.

Por último se muestran los valores de la energía de la tabla 5.6

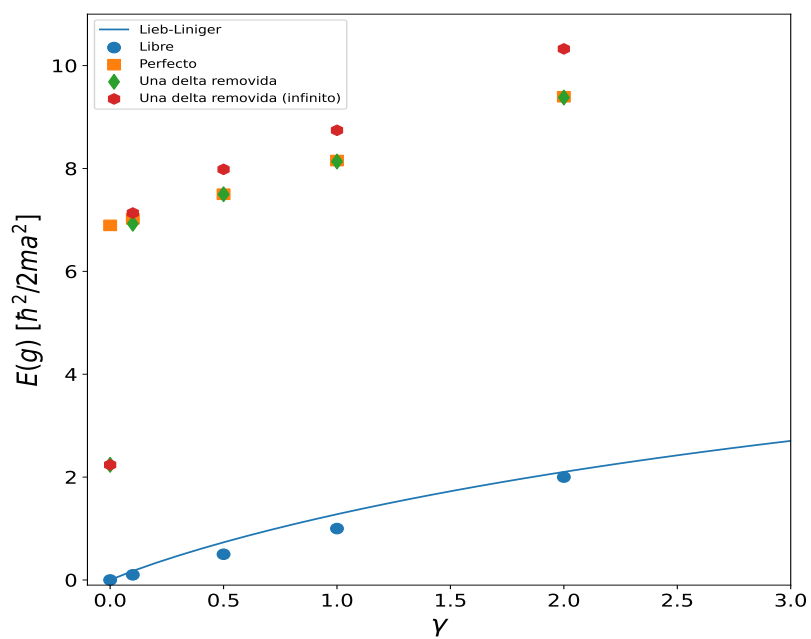


Figura 5.9: Valores de la energía graficados junto a la energía de Lieb-Liniger, los valores se encuentran en la tabla 5.6

Conclusiones

Calculamos la energía del estado base de un gas de Bose debilmente interactuante en una dimensión dentro de estructuras periódicas perfectas e imperfectas. Las estructuras se generan aplicando al gas de bosones el potencial Peine de Dirac en una dirección tal que generamos una cadena de puntos dispersivos como átomos en un cristal. Producimos vacancias en el cristal quitando al azar una fracción de deltas del potencial Peine de Dirac quedándonos con el cristal imperfecto. El tamaño del sistema se varió aumentando el número de deltas originales pero manteniendo constante tanto la separación entre las deltas como la densidad de partículas. También obtuvimos y graficamos la función de densidad de probabilidad de algunos de los sistemas analizados. Al calcular la energía del estado base por partícula dentro de la estructura perfecta la energía aumentó respecto al caso del gas de Bose libre, haciéndolo de manera proporcional a la intensidad de las deltas. Sin embargo al introducir las vacancias la energía disminuye como función de la proporción de vacancias a partir del valor del caso sin vacancias. Cuando la fracción de vacancias es del 100 % recuperamos las energías de los casos libre con y sin interacción. De aquí que la presencia de vacancias disminuye la energía del sistema haciéndolo más estable. Esta bien estudiado que en el caso del gas ideal (i.e. $g = 0$) una sola imperfección afecta a la energía del estado base de forma considerable, tanto es así que su presencia genera la CBE en una dimensión. Este cambio en la energía del estado base se ve también cuando las interacciones son pequeñas (ceranas a cero). Sin embargo, aunque no podemos ver si hay transición de fase con solo este análisis, es un buen indicio saber la forma en que las vacancias afecta las energías del estado base de los sistemas interactuantes. En este análisis de la energía del estado base tampoco encontramos una proporción de vacancias que maximice el valor de la energía, sin embargo esto no significa que no exista una proporción de vacancias que promueva la transición de fase de mejor manera, simplemente se necesitan otros mecanismos de estudio para encontrarla. En cuanto a la densidad de probabilidad, ésta muestra localización de las partículas en las posiciones de las vacancias pero que se va perdiendo conforme las

6. CONCLUSIONES

interacciones repulsivas entre las partículas aumenta. Uno de los fines para crecer el sistema es encontrar los valores de la energía del estado base en el infinito. Para esto se hizo una extrapolación a un sistema en el cual el valor de la interacción g era uno y en la que encontramos que la energía en el infinito tiene un valor que dista dos unidades cuando el sistema solo tiene diez deltas. Sin embargo cuando el sistema ya cuenta con mil deltas los valores solo se separan en cifras significativas, lo que nos da a entender que una primera aproximación interesante para continuar este trabajo sería analizar los sistemas con mil deltas. Que en términos computacionales son bastante razonables. Respecto a los algoritmos computacionales utilizados en esta tesis los valoramos como suficientemente eficientes para resolver las ecuaciones Gross-Pitaevskii para los sistemas analizados a un costo de tiempo/recursos bastante bueno.

En el caso del potencial químico, lo que encontramos es que las interacciones influyen en él significativamente, haciendo que el valor de éste sea mayor que el de la energía del estado base. De esto podemos deducir que hay un mecanismo que conecta directamente las interacciones con el potencial químico y podría ser una vía de estudio para encontrar algunos otros resultados. Siempre tomando en cuenta que hacer crecer los sistemas significa más tiempo de computo.

Bibliografía

- [1] A. Einstein, “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”, *Sitzungsber.phys.-math., Gesamtsitzung* **10**, 245 (1924), (Translation by L. Amendola, ITP, University of Heidelberg, 2015). [1](#)
- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E Wieman, E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor”, *Science* **269**, 198 (1995). [1](#)
- [3] W. Ketterle, et al., “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995). [1](#)
- [4] V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, M. A. Solís, “Bose–Einstein condensation for general dispersion relations”, *Eur. J. Phys.* **201**, 77 (1999). [1](#), [7](#)
- [5] J. G. Martínez-Herrera, et al., “Bose gas with generalized dispersion relation-plus an energy gap”, *Phys. Scr.* **94**, 075002 (2019). [1](#), [2](#)
- [6] V. Bagnato, D. E. Pritchard, D. Kleppner, “Bose-Einstein condensation in an external potential”, *Phys. Rev. A* **35**, 10 (1986). [1](#)
- [7] J. García , “Condensación Bose Einstein en cristales con vacancias”, Tesis de Maestría (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2018). [2](#), [19](#), [20](#)
- [8] J. M. Luttinger and H. K. Sy, “Bose-Einstein Condensation in a One-Dimensional Model with Random Impurities*”, *Phys. Rev. A* **7**, 712 (1973). [2](#)
- [9] J. M. Luttinger and H. K. Sy, “Low-Lying Energy Spectrum of a One-Dimensional Disordered System”, *Phys. Rev. A* **7**, 701 (1973). [2](#)
- [10] E. Guerrero, “Efecto de las vacancias en la condensación Bose-Einstein de un gas ideal de bosones dentro de estructuras periódicas imperfectas”, Tesis de

BIBLIOGRAFÍA

- Licenciatura, (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2020). [2](#), [30](#)
- [11] E. Kengne, “Exact solutions of the Gross-Pitaevskii equation in periodic potential in the presence of external source”, *J. Math. Phys.* **48**, 073520 (2007). [2](#)
- [12] O. A. Rodríguez, “Interacting bose gas in multi-rod lattices : ground state properties and quantum phase transitions ”, Tesis de Doctorado, (Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2020). [2](#), [13](#), [21](#)
- [13] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, “Many-Body Physics with Ultracold Gases”, arXiv:0704.3011v2 (2008). [2](#)
- [14] P. Kapitza, “Viscosity of Liquid Helium below the Point”, *Nature* **141**, 74 (1938). [2](#)
- [15] J. Allen, A. D. Misener, “New Phenomena Connected with Heat Flow in Helium II”, *Nature* **141**, 243 (1938). [2](#)
- [16] F. London, “The Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy”, *Nature* **141**, 643 (1938). [2](#)
- [17] M. C. Gordillo, J. Boronat, “H₂ superglass on an amorphous carbon substrate” *Phys. Rev. B* **107**, L060505 (2023).
- [18] J. Riechel and V. Vuletic, *Atom chips* (Wiley, 2011) 1st ed. [3](#)
- [19] P. Böhi, “Coherent manipulation of Bose–Einstein condensates with state-dependent microwave potentials on an atom chip” *Nature Phys.* **5**, 592 (2009). [3](#)
- [20] M. F. Riedel et al. “Atom-chip-based generation of entanglement for quantum metrology “ *Nature* **464**, 1170 (2010). [3](#)
- [21] P. Anisimov et al. “Quantum Metrology with Two-Mode Squeezed Vacuum: Parity Detection Beats the Heisenberg Limit” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 103602 (2010). [3](#)
- [22] F. London “On the Bose-Einstein Condensation”, *Phys. Rev.* **54**, 947 (1938). [5](#)
- [23] R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistical Mechanics*(Academic Press, Boston, MA, 2011), 3rd ed. [6](#)

- [24] N. N. Bogolyubov, “On the theory of superfluidity”, J. Phys.(USSR) **11**, 23 (1947). [7](#)
- [25] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, New York, 2008), 2nd ed. [8](#)
- [26] L. Pitaevski, S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity* (Oxford University Press, New York, 2016) 1st ed. [9](#), [12](#)
- [27] E. P. Gross, “Structure of a quantized vortex in boson systems”, Nuovo Cim **20**, 454 (1961). [10](#)
- [28] L. Pitaevskii , “Leech Lattice Extension of the Non-Linear Schrödinger Equation Theory of Einstein Spaces”, Soviet Physics JETP **13**, 451 (1961). [10](#)
- [29] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari “Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases” Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999). [10](#)
- [30] E. H. Lieb and W. Liniger, “Exact Analysis of an Interacting Bose Gas. The General Solution and the Ground State”, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963). [12](#)
- [31] H. Bethe, *On the Theory of Metals, I. Eigenvalues and Eigenfunctions of a Linear Chain of Atoms* (World Scientific, 1997) [12](#)
- [32] R. de L. Kronig, W. G-Penney, “Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices”, Proc. Roy. Soc. **130**, 499 (1930). [15](#)
- [33] W. Bao, Y. Cai, “Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein Condensation”, Kinetic and Related Models **6**, 1 (2013). [24](#)
- [34] T. Tsuzuki, “Nonlinear waves in the Pitaevskii-Gross equation”, J. Low-Temp. Phys. **4**, 441 (1971). [21](#)
- [35] B. T. Seaman, L. D. Carr, and M. J. Holland, “Effect of a potential step or impurity on the Bose-Einstein condensate mean field”, Phys. Rev. A **71**, 033609 (2005). [21](#)
- [36] W. T. Wang, Y. Y. Li, and S. J. Yang, “Exact solutions to the three-dimensional Gross-Pitaevskii equation with modulated radial nonlinearity”, Mod. Phys. Lett. B **27**, 1350105 (2013). [21](#)
- [37] K. Berg-Sørensen and K. Mølmer, “Bose-Einstein condensates in spatially periodic potentials”, Phys. Rev. A **58**, 1480 (1998). [21](#)

BIBLIOGRAFÍA

- [38] M. Krämer, C. Menotti, L. Pitaevskii, and S. Stringari, “Bose-Einstein condensates in 1D optical lattices: Compressibility, Bloch bands and elementary excitations”, *Eur. Phys. J. D* **27**, 247 (2003). [21](#)
- [39] W. Li and A. Smerzi, “Nonlinear Kronig-Penney model”, *Phys. Rev. E* **70**, 016605 (2004). [21](#)