



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Propiedades estacionarias y dinámicas de una junta de
Josephson bosónica en la aproximación de dos bandas**

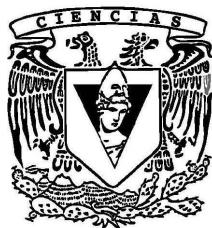
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

P R E S E N T A :

Pablo Enrique Yanes Thomas



**DIRECTOR DE TESIS:
Doctora Rosario Paredes Gutiérrez
2013**



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.

Resumen

Se estudió el sistema compuesto por un gas diluido de bosones interactuantes ultrafríos en una junta de Josephson bajo la aproximación de dos bandas. Para esto se propuso y se justificó un Hamiltoniano modelo. Posteriormente se utilizaron métodos numéricos para determinar las propiedades estacionarias y dinámicas de los operadores de un cuerpo, en particular los operadores de población correspondientes a cada pozo. Se analizaron los efectos del número total de partículas, de la población inicial de los pozos y de la energía de interacción sobre los valores de la población de los pozos, tanto estacionaria como dinámica.

Índice general

1. Motivación Experimental	6
1.1. Condensados de Bose-Einstein	6
1.2. Condensados de Bose-Einstein en el Laboratorio	7
1.2.1. Enfriamiento Láser	7
1.2.2. Enfriamiento por Evaporación	7
1.3. Potenciales Ópticos	8
1.3.1. Redes Ópticas	9
1.3.2. Interacción entre Partículas	9
1.4. Juntas de Josephson	10
1.5. Gases Ultrafríos en Pozos Dobles: experimentos realizados hasta hoy	10
2. El Hamiltoniano de Doble Pozo	11
2.1. Introducción	11
2.2. Segunda Cuantización	14
2.3. La Base de Fock	16
2.4. Efecto sobre Kets	17
2.5. Parámetros para la Matriz	19
3. Estados Estacionarios	26
4. Comportamiento Dinámico	30
4.1. Pozo Vacío	32
4.2. Pozo Lleno	35
4.3. Pozo Simétrico	38
4.3.1. Análisis	42
4.4. Dinámica de estados separados	42
4.4.1. Pozo Lleno	43
4.4.2. Pozo Vacío	44
4.5. Análisis	45
4.5.1. Variación de N	46

4.5.2. Variación de U_0	50
4.5.3. Análisis	54
5. Tiempos de Recurrencia y Relajación	55
6. Conclusiones	61
A. Tiempos de Cómputo	65
B. Código Generador: Base de Fock	68
C. Código Generador: Hamiltoniano	70
D. Código Generador: Eigenvalores y Eigenvectores	71
E. Código Generador: Valores de Expectación para el Operador Número	77
F. Código: Evolución Temporal	80

Índice de figuras

2.1.	e_1, e_2, e_3, e_4 vs a . Niveles de energía de la funciones de onda correspondientes al doble pozo.	20
2.2.	Primeras cuatro funciones de onda para el potencial de doble pozo. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$	21
2.3.	Primeras dos funciones de onda localizadas para el potencial de doble pozo. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$	22
2.4.	Siguientes dos funciones de onda para el potencial de doble pozo. Las líneas indican los centros de los pozos. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$	23
2.5.	Primeros 40 eigenvalores contra el valor de la interacción. La energía se normaliza al valor de $\hbar\Omega$. La línea superior que cambia su pendiente de forma repentina indica un cruce de eigenvalores.	24
3.1.	Valor de expectación del operador \hat{N}_L para 40 partículas para todos los eigenvectores en función de su eigenvalor correspondiente. $U = 0,001,0,01,0,1$	27
3.2.	Valor de expectación del operador \hat{N}_L para 20 partículas para todos los eigenvectores en función de su eigenvalor correspondiente. $U = 0,001,0,01,0,1$	28
4.1.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	32
4.2.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	33
4.3.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_4 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	34

4.4.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	35
4.5.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10, n_3 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	36
4.6.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_3 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	37
4.7.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10, n_2 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	38
4.8.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_3 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	39
4.9.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	40
4.10.	Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 10, n_3 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$	41
4.11.	Comportamiento de estados individuales en el régimen de pozo lleno.	43
4.12.	Comportamiento de estados individuales en el régimen de pozo vacío.	44
4.13.	$N=5, U_0 = 0,001$	46
4.14.	$N=10, U_0 = 0,001$	47
4.15.	$N=20, U_0 = 0,001$	48
4.16.	$N=40, U_0 = 0,001$	49
4.17.	$N=20, U_0 = 0,00001$	50
4.18.	$N=20, U_0 = 0,0001$	51
4.19.	$N=20, U_0 = 0,001$	52
4.20.	$N=20, U_0 = 0,01$	53
5.1.	Tiempo de relajación del sistema en función del número de partículas. El ajuste corresponde a una función del tipo $Ae^{-\frac{N}{\tau}} + t_0$. El ajuste da los valores: $A = 1,591,0577, \tau = 10,4735$ y $t_0 = 560,6379$. El ajuste tiene $R^2 = ,9981$	56

5.2.	Tiempo de recurrencia del sistema en función del número de partículas. Debido a que el punto exacto de recurrencia es difícil de localizar sin un tamaño de paso de tiempo mucho más pequeño del utilizado, los datos presentan cierta variabilidad. No se presenta un ajuste pues se considera que los datos no muestran variación respecto a N	57
5.3.	Tiempo de recurrencia del sistema en función del valor de la interacción. Se presentan los logaritmos en base 10 de tanto el tiempo como de la interacción. Se realizó un ajuste lineal de la forma $Ax + t_0$ con $A = -1,0866$, y $t_0 = -0,3148$. El ajuste tiene $R^2 = ,9999$	58
5.4.	Tiempo de relajación del sistema en función del valor de la interacción. Se presentan los logaritmos en base 10 de tanto el tiempo como de la interacción. Se realizó un ajuste lineal de la forma $Ax + t_0$ con $A = -0,9964$, y $t_0 = 0,6375$. El ajuste tiene $R^2 = ,9999$	59
A.1.	Tiempo de cómputo en segundos contra número de partículas que ocupa la solución de un eigensistema	66
A.2.	Tiempo de cómputo en segundos contra número de partículas que ocupa realizar 100 iteraciones de evolución temporal . . .	67

Capítulo 1

Motivación Experimental

1.1. Condensados de Bose-Einstein

La población o número de bosones que ocupan un estado de una partícula en un gas ideal está dado, en el ensamble gran canónico por [1]:

$$f_{BEC}(\epsilon_i, \mu, T) = N_i = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}} - 1}. \quad (1.1)$$

Donde ϵ_i es la energía del estado, μ es el potencial químico del sistema y T la temperatura del sistema. Para este tipo de sistemas, existe una temperatura crítica T_c debajo de la cual la ocupación del estado base es macroscópica. Por debajo de esta temperatura, la población de los estados excitados esta dada por:

$$N_{ex} = \int_0^\infty g(\epsilon) f_{BEC}(\epsilon, \mu, T) d\epsilon, \quad (1.2)$$

$g(\epsilon)$ es la densidad de estados entre las energías ϵ y $\epsilon + d\epsilon$. Este número es máximo para $\mu = 0$. Para la temperatura crítica:

$$N_{ex} = N = \int_0^\infty g(\epsilon) f_{BEC}(\epsilon, 0, T_c) d\epsilon. \quad (1.3)$$

Para temperaturas por debajo de T_c , se tiene que:

$$N_{ex} = \int_0^\infty g(\epsilon) f_{BEC}(\epsilon, 0, T) d\epsilon. \quad (1.4)$$

Las demás partículas deben encontrarse en el estado base. Por ende la población del estado base es:

$$N_0 = N - N_{ex} = N[1 - (\frac{T}{T_c})^\alpha] \quad (1.5)$$

α es un parámetro que depende del número de dimensiones en el cual se mueven las partículas [2]. Para un potencial externo de oscilador armónico, α es igual al número de dimensiones. Conforme T cae por debajo de T_c la población del estado base, N_0 aumenta rápidamente, lo cual lleva a un estado donde casi todas las partículas se encuentran en el estado base. Esto es lo que se conoce como Condensación de Bose-Einstein.

1.2. Condensados de Bose-Einstein en el Laboratorio

Los primeros éxitos en condensación de Bose-Einstein en el laboratorio se lograron en 1995 en Texas, Colorado y Massachussets en Estados Unidos. Esta condensación se logró con átomos de Rubidio [4] y Litio [5] Para lograr el estado de condensado se enfrió una nube de átomos neutros en forma gaseosa y de una densidad de cerca de $10^{14}cm^{-3}$ a temperaturas del orden de $50nK$ [6], aprovechando el intercambio de energía de la materia al interactuar con la radiación. Las dos técnicas principales para lograr la condensación son el enfriamiento láser y enfriamiento por evaporación[7][8].

1.2.1. Enfriamiento Láser

Los primero átomos utilizados para lograr condensación de Bose-Einstein fueron alcalinos ya que estos se comportan como átomos hidrogenoides. El enfriamiento láser consiste en dispersar la energía de los átomos mediante emisiones repetidas del electrón más distante del núcleo. La técnica aprovecha el efecto Doppler, la luz se encuentra ajustada del tal manera que el átomo generalmente solo absorbe un fotón si se mueven justo en la dirección del láser, de manera contraria la luz incidente no es absorbida. La disipación de energía se debe a que los fotones se emiten en direcciones arbitrarias. Utilizando esta técnica se pueden reducir las velocidades de los átomos a alrededor de $30cm/s$. Sin embargo, la siguiente técnica es capaz de reducir la temperatura de los átomos aún más.

1.2.2. Enfriamiento por Evaporación

El enfriamiento por evaporación consiste en retirar selectivamente los átomos más energéticos de una nube, dejar que los demás átomos lleguen a

equilibrio mediante colisiones y luego repetir el proceso hasta lograr la temperatura deseada. Para remover los átomos más energéticos se aprovecha el hecho de que los átomos utilizados tienen un momento dipolar magnético muy grande. Los átomos se confinan en un campo magnético y quedan efectivamente atrapados en un potencial de oscilador armónico. Al aplicar un pulso de radio frecuencia con la misma energía que el máximo nivel de energía ocupado del potencial de oscilador, se invierte el espín de los átomos en este nivel y estos escapan del potencial. Los demás átomos entonces llegan a un equilibrio con una temperatura más baja. El proceso se puede repetir hasta conseguir los parámetros deseados.

1.3. Potenciales Ópticos

El confinamiento de átomos por medios ópticos es el resultado de la interacción del campo eléctrico con el dipolo de un átomo neutro. Se considera el caso de un átomo acoplado a un láser con frecuencia ω_l y número de onda k_l , se forma una onda estacionaria mediante el uso de dos láseres propagándose en sentidos contrarios [9]. En la aproximación del dipolo, la interacción entre el átomo y el láser está dada por:

$$\hat{H}_d = -\mu \cdot E(\hat{x}, t) \quad (1.6)$$

μ es el momento dipolar del átomo y $E(\hat{x}, t)$ es el campo eléctrico y es de la forma:

$$E(\hat{x}, t) = E_0(\hat{x}) \cos(\omega_l t) \quad (1.7)$$

Si el átomo se encuentra inicialmente en el estado base, $|b\rangle$ entonces saltará al estado excitado $|e\rangle$. La diferencia en la energía de los dos estados es $\hbar\omega_{be}$. Bajo estas condiciones el cambio en la energía del estado base es:

$$\Delta E_b(x) = -\hbar \frac{\Omega_R(x)^2}{\delta} \quad (1.8)$$

$\hbar\Omega_R$ se conoce como la frecuencia de Rabi efectiva y $\delta = \omega_l - \omega_{be}$ es la diferencia en frecuencias. La expresión asume que ω_l es cercana a la frecuencia de resonancia para evitar que el estado base se acople a más de un nivel. La expresión asume estados de vida infinita y requiere $|\delta| \gg \Omega_R$. El corrimiento de la energía del estado base es equivalente a un potencial efectivo:

$$V_{lattice} = -\hbar \frac{\Omega_R(x)^2}{\delta} = -V_0 \sin^2(k_l x) \quad (1.9)$$

A este potencial se le conoce como red óptica. $\hbar \frac{\Omega_R(x)^2}{\delta}$ es la profundidad del potencial. La ventaja de este tipo de potencial es que es fácilmente ajustado alterando los parámetros del láser. La geometría del arreglo se puede ajustar para crear un potencial con el número de sitios, intensidad de barrera y asimetría deseadas.

1.3.1. Redes Ópticas

El uso de redes ópticas permite generar potenciales de una gran variedad de características simplemente alterando el arreglo experimental, por ejemplo al agregar más rayos o variar el ángulo de incidencia [10]. En esta tesis se considera únicamente el caso de un potencial con las siguientes características:

1. 1D, el estudio se limita a un potencial de una sola dimensión.
2. Simétrico. Existe mucho trabajo sobre potenciales de doble pozo en los cuales se introduce un parámetro de "tilt" donde uno de los dos pozos es menos profundo que el otro. Esto también puede controlarse de manera dinámica en el arreglo experimental.
3. Modelable. El estudio se limita a un potencial que pueda ser modelado fácilmente por una función continua y diferenciable, en este caso se utiliza un potencial modelado por un polinomio.

Este potencial es de muchas formas el más simple posible para este tipo de sistemas. También es posible aumentar el número de sitios y crear potenciales de varios sitios donde solo ciertos sitios de red se encuentran conectados.

1.3.2. Interacción entre Partículas

Existen muchos tipos de interacciones posibles entre partículas. En este estudio se supone un gas lo suficientemente diluido como para ignorar toda interacción entre más de dos partículas. En realidad las interacciones entre partículas son extremadamente complejas, este trabajo se limitará a modelar el caso de una interacción de contacto simple:

$$U(x_i - x_j) = g\delta(x_i - x_j) \quad (1.10)$$

con:

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (1.11)$$

g marca la intensidad de la interacción, a es la longitud de dispersión y m la masa. Se considera solo el caso de interacción repulsiva ($U > 0$), y se estudia el efecto de variar la intensidad de la interacción entre las partículas. Este tipo de interacción, llamada efectiva, es válida para gases diluidos y de baja energía[2].

1.4. Juntas de Josephson

En 1962 [3] Brian D Josephson predijo el flujo de electrones entre dos superconductores unidos por un aislante delgado, aún cuando no se aplica ningún voltaje. Este efecto se conoce como el Efecto Josephson-DC. Al aplicar un voltaje no se obtiene una corriente directa, si no en una corriente que oscila rápidamente lo cual se conoce como el efecto Josephson-ac. Los condensados de Bose-Einstein confinados en un potencial de doble pozo surgen como una opción para estudiar este tipo de efectos.

1.5. Gases Ultrafríos en Pozos Dobles: experimentos realizados hasta hoy

Recientemente se han realizado experimentos donde se utilizan sistemas de pozos dobles para crear puertas lógicas cuánticas[11]. Los sistemas de condensados de Bose-Einstein también pueden utilizarse en el campo de la gravitometría [12], ya que un gradiente gravitacional puede introducir asimetría a un sistema de pozos perfectamente simétricos. Dado que un sistema como este es análogo a un cristal de estado sólido[13], estos sistemas pueden utilizarse como modelos. Los sistemas de doble pozo también permiten el estudio de propiedades cuánticas de muchos cuerpos en sistemas que son relativamente fáciles de modelar y de controlar experimentalmente.

Capítulo 2

El Hamiltoniano de Doble Pozo

2.1. Introducción

El objetivo de esta sección es deducir el Hamiltoniano de un fluido de Bose en un potencial de doble pozo en 1D. Para un sistema de N bosones, el hamiltoniano de primera cuantización es [14]:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{P}_i}{2m_i} + \sum_{i<j} U(|\bar{x}_i - \bar{x}_j|) + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\bar{x}_i), \quad (2.1)$$

Donde U representa la interacción entre pares. V_{ext} es el potencial externo aplicado al fluido. Se asume que el gas está lo suficientemente diluido como para despreciar interacciones entre más de dos partículas. Se requiere $|\Psi\rangle$ tal que cumpla con la ecuación de Schrödinger para el sistema:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Esta Ψ se expresa en una base tal que:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\{m\}} C_{\{m\}} |\{m\}\rangle, \quad (2.3)$$

Donde $\{m\}$ es el conjunto de los números cuánticos que definen un estado de N partículas. Esta base cumple con:

$$\text{Ortonormalidad: } \langle \{m\} | \{n\} \rangle = \delta_{mn}, \quad (2.4)$$

$$\text{Completez: } \sum_{\{m\}} |\{m\}\rangle \langle \{m\}| = \hat{1}. \quad (2.5)$$

Sustituir en la ecuación de Schrödinger da las ecuaciones necesarias para calcular los coeficientes de la expansión en esta base:

$$i\hbar \frac{\partial C_{\{m\}}(t)}{\partial t} = \sum_{\{n\}} \langle \{m\} | \hat{H} | \{n\} \rangle C_{\{n\}}. \quad (2.6)$$

Para un gas ideal, la interacción es igual a cero. El Hamiltoniano entonces es:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{P}_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^N V_{ext}(\vec{r}_i). \quad (2.7)$$

Como base, la propuesta es utilizar el producto de N estados de una partícula:

$$\text{Momento: } \overline{p} | \overline{k}, \overline{m} \rangle = \hbar \overline{k} | \overline{k}, \overline{m} \rangle \quad (2.8)$$

$$\text{Espín: } \overline{S}_z | \overline{k}, \overline{m} \rangle = \hbar \overline{m} | \overline{k}, \overline{m} \rangle. \quad (2.9)$$

En este modelo se considera que los átomos se encuentran polarizados y por lo tanto sus espines se encuentran alineados y el sistema se encuentra en un estado hiperfino, por lo que no se hace referencia a los mismos. Como base se utilizan las funciones:

$$\phi_{\overline{k}, \overline{m}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\overline{k} \cdot \vec{x}} \chi_{\overline{m}}. \quad (2.10)$$

El producto de N de estos estados da un estado del sistema de N partículas:

$$\phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \phi_{k_1}(x_1) \phi_{k_2}(x_2) \dots \phi_{k_N}(x_N). \quad (2.11)$$

El estado base corresponde a

$$k_i = 0 \quad \forall i$$

y el Hamiltoniano del gas ideal actúa de la siguiente forma sobre esos estados:

$$\hat{H}_0 \phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \left(\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \right) \phi(x_1, x_2, \dots, x_N). \quad (2.12)$$

En este caso se está tratando con bosones, por lo que las funciones de onda son simétricas ante el intercambio de índices. Las funciones de onda que cumplen esto son las Ψ de la forma:

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(B)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{n_{k_1}! \dots n_{k_N}!}{N!}} \sum_{perm} \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N}. \quad (2.13)$$

La suma es sobre las permutaciones posibles. El número n_{k_i} nos dice que hay n partículas con $k = k_i$. Es importante notar que esto es posible al tratarse de bosones. La única restricción es:

$$\sum_k n_k = N. \quad (2.14)$$

Para trabajar el problema computacionalmente, se utiliza la base de Fock. El espacio que generan estos estados es el espacio de Fock.

$$|n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}\rangle = |n_{k_0}\rangle \otimes |n_{k_1}\rangle \otimes \dots \otimes |n_{k_\infty}\rangle. \quad (2.15)$$

Esto dice que hay n_{k_1} partículas en el estado k_1 , n_{k_2} en el estado k_2 , etc. En el caso de fermiones, este número es 0 o 1, en el caso de bosones, el número de ocupación va de 0 a N . Estos estados conforman una base. Para cada número k , definimos dos operadores: b_k y b_k^\dagger . Estos operadores siguen las reglas de conmutación:

$$[b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (2.16)$$

$$[b_k, b_{k'}] = [b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger] = 0. \quad (2.17)$$

De estas reglas de conmutación podemos ver las siguientes propiedades:

$$b_k^\dagger b_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle. \quad (2.18)$$

$$b_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle.$$

$$b_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle.$$

Debido a estas propiedades b_k es el operador de aniquilación, y b_k^\dagger es el operador de creación. El operador $b_k^\dagger b_k$ es el operador número y dice cuantas partículas tiene un estado particular. La base de Fock es *completamente equivalente* a la base:

$$\Psi_{k_1, k_2, \dots, k_N}^{(B)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{n_{k_1}! \dots n_{k_N}!}{N!}} \sum_{perm} \phi_{k_1} \dots \phi_{k_N}.$$

La información que esta base da es: Ψ es la amplitud de probabilidad de encontrar N partículas con coordenadas (tanto de espín como espaciales) $\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N$ dado que existen n_{k_1} partículas en el estado k_1 , n_{k_2} en el estado k_2 , y así, con la restricción expresada en (2.14). Esto se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\phi_{n_{k_0}, \dots, n_{k_\infty}}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N) = \sqrt{\frac{n_{k_0}! n_{k_1}! \dots n_{k_\infty}!}{N!}} \sum_{perm} \phi_{k_1}(\bar{x}_1) \dots \phi_{k_N}(\bar{x}_N). \quad (2.19)$$

El conjunto $\{k_1, k_2, \dots, k_N\}$ está bien definido para valores dados de k_j , en este conjunto puede haber varias k_j iguales entre sí (al tratarse de bosones). Con el conjunto de las k bien definido, inmediatamente queda definido el conjunto de los números de ocupación, siempre con la restricción (2.14). Es importante notar que aún si existe un número infinito de estados, los números de ocupación pueden ser cero, y no hay dificultad en cumplir la restricción. El estado denotado por (2.19) queda representado de manera única. Esto permite representar una $|\Psi(t)\rangle$ arbitraria en esta base:

$$\Psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N) = \langle \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_N | \Psi(t) \rangle. \quad (2.20)$$

$$= \sum_{n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}} C(n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}) \phi_{n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N).$$

Donde la suma $\sum_{n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}}$ es sobre todos los valores de n , dada la restricción (2.14).

2.2. Segunda Cuantización

El expandir $|\Psi(t)\rangle$ en la base de números de ocupación produce[14]:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}} C(n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}; t) |n_{k_0}, n_{k_1}, \dots, n_{k_\infty}\rangle. \quad (2.21)$$

Las constantes C son las mismas que en (2.13), siempre y cuando el Hamiltoniano se exprese de la forma:

$$\hat{H} = \sum_{kk'} \langle k' | \hat{h}_0 | k \rangle b_{k'}^\dagger b_k + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_1 k_2 | U | k_3 k_4 \rangle b_{k_1}^\dagger b_{k_2}^\dagger b_{k_3} b_{k_4}. \quad (2.22)$$

h_0 es el Hamiltoniano (2.7) y:

$$\langle k' | \hat{h}_0 | k \rangle = \int \phi_{k'}^*(\bar{x}) \left(-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\bar{x}) \right) \phi_k(\bar{x}) dx. \quad (2.23)$$

$$\langle k_1 k_2 | U | k_3 k_4 \rangle = \int \int \phi_{k_1}^*(\bar{x}) \phi_{k_2}^*(\bar{x}') U(|\bar{x} - \bar{x}'|) \phi_{k_3}(\bar{x}) \phi_{k_4}(\bar{x}'). \quad (2.24)$$

Como se menciona en el capítulo previo, la interacción U se puede modelar como una interacción de contacto, es decir:

$$U = g\delta(x - x'), \quad (2.25)$$

y el potencial como:

$$V(x) = V_{armonico}(x) + V_{red}(x). \quad (2.26)$$

Es importante notar que las $\phi(x)$ que aparecen en las expresiones anteriores no son las funciones de onda de una partícula en un potencial, son las funciones de onda localizadas de varias partículas en el potencial de red óptica. En el trabajo [17] se calculan estas funciones localizadas con base en las funciones de onda de una partícula bajo la influencia del potencial de doble pozo.

Expresando todo así, se llega a la expresión final del Hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \sum_{i,j;m,n} J_{ij}^{mn} b_j^{(m)\dagger} b_i^{(n)} + \sum_{i,j,k,l;m,n,p,q} \frac{U_{ijkl}^{mnpq}}{2} b_i^{(m)\dagger} b_j^{(n)\dagger} b_k^{(p)} b_l^{(q)} + \sum_{i,j;m,n} \epsilon_{ij}^{mn} b_i^{(m)\dagger} b_j^{(n)}. \quad (2.27)$$

Con:

$$J_{ij}^{mn} = - \int \phi_i^{(m)*}(\bar{x}) \left[\frac{\hat{P}}{2m} + V_{lat}(\bar{x}) \right] \phi_j^{(n)}(\bar{x}) dx,$$

$$U_{ijkl}^{mnpq} = g \int dr \phi_i^{(m)*} \phi_j^{(n)*} \phi_k^{(p)} \phi_l^{(q)},$$

$$\epsilon_{ij}^{mn} = \int dr \phi_i^{(m)*}(\bar{x}) V_{ext}(\bar{x}) \phi_j^{(n)}(\bar{x}),$$

Los índices i, j denotan sitios de red y los m, n denotan niveles energéticos. Esto es para un sistema más general del que interesa modelar. En el sistema que se analizará en este trabajo, solo existen dos sitios de red, cada uno con dos modos energéticos.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1 + \hat{H}^{01}. \quad (2.28)$$

Con:

$$\hat{H}^l = -J^i \sum_{j \neq j'} b_j^{l\dagger} b_{j'}^l + U^l \sum_j n_j^i (n_j^i - 1) + E^l (n_L^l + n_R^l), \quad (2.29)$$

y:

$$\hat{H}^{01} \equiv U^{01} \sum_{j,l,l'} (2n_j^i n_{j'}^{l'} + b_j^{l\dagger} b_j^{l\dagger} b_{j'}^{l'} b_{j'}^{l'}). \quad (2.30)$$

Este termino acopla los niveles de energía. Los sub-índices l, l' son tales que $l, l' \in 0, 1$ lo cual indica el nivel de energía y los índices $j, j' \in L, R$ indican el sitio de red. En esta aproximación, se asume que las partículas individuales se encuentran en los primeros cuatro niveles de energía: el estado base y tres primeras excitaciones. Para la aproximación de dos bandas, se utiliza un potencial de dos pozos, de manera tal que los cuatro primeros niveles de energía se agrupen en dos bandas. Para determinar los parámetros del potencial, se utiliza el trabajo [17]. La distancia entre dos niveles en la misma banda es J^i , la energía correspondiente cada banda es E_i . En esta aproximación existen solo cuatro estados posibles para cada partícula, y el sistema queda descrito al especificar cuantas partículas se encuentran en cada uno de los cuatro estados. La notación utilizada es la siguiente:

- $n_L^0 = n_1$
- $n_R^0 = n_2$
- $n_L^1 = n_3$
- $n_R^1 = n_4$

2.3. La Base de Fock

Un ket escrito con la notación anterior es de la forma $|n_1, n_2, n_3, n_4\rangle$. Cada uno de los cuatro números indica cuantas partículas se encuentran en cada uno de los cuatro estados posibles para la aproximación de dos bandas estado base y excitado del pozo izquierdo o derecho. Si el sistema está compuesto por N partículas entonces los números n_i deben de obedecer la condición[15]:

$$n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = N$$

Dado el número total de partículas, es posible crear un algoritmo que genere todos los kets de la base. Esto se debe a que la base es la solución a un problema de análisis combinatorio. Específicamente es el problema correspondiente a encontrar todas las formas posibles de acomodar N objetos sin etiquetas en 4 cajas *con etiquetas*. Cada caja corresponde a uno de los cuatro estados posibles y cada objeto es una partícula. La forma de solucionar el problema es pensar en los N objetos colocados en fila y todas las formas de particionarlos colocando tres divisiones en los $N + 1$ espacios entre ellos, si se considera colocar divisiones antes del primer objeto y después del último. Si tenemos 3 objetos, entonces existen 4 espacios entre ellos si incluimos los espacios antes del primero y después del último. Desde esta perspectiva, las divisiones no tienen nombre y pueden ocupar la misma posición. Si d_i corresponde a la posición de la i -ésima división y $i = 0$ para el primer espacio, los números de ocupación resultan ser:

$$\begin{aligned}n_1 &= d_1 \\n_2 &= d_2 - d_1 \\n_3 &= d_3 - d_2 \\n_4 &= N - d_3.\end{aligned}$$

Para obtener todas las combinaciones, primero se selecciona d_1 de $\{0, 1, 2, \dots, N\}$, luego seleccionamos d_2 de $\{d_1, \dots, N\}$ y finalmente d_3 de $\{d_2, \dots, N\}$. Con estos parámetros existen $\binom{N+3}{3}$ o $\frac{(N+3)(N+2)(N+1)}{6} = \Omega$ kets en la base.

2.4. Efecto sobre Kets

Si se ven los términos del Hamiltoniano (2.28) de forma explícita se obtiene[16]:

$$\begin{aligned}H^0 &\equiv -J^0(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1) \\&\quad + U^0(n_1(n_1 - 1) + n_2(n_2 - 1)) \\&\quad + E^0(n_1 + n_2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H^1 &\equiv -J^1(b_3^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_3) \\&\quad + U^1(n_3(n_3 - 1) + n_4(n_4 - 1)) \\&\quad + E^1(n_3 + n_4),\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
H^{01} \equiv & (2n_1n_3 + b_1^\dagger b_1^\dagger b_3 b_3) \\
& (2n_2n_4 + b_2^\dagger b_2^\dagger b_4 b_4) \\
& (2n_3n_1 + b_3^\dagger b_3^\dagger b_1 b_1) \\
& (2n_4n_2 + b_4^\dagger b_4^\dagger b_2 b_2),
\end{aligned}$$

Los operadores de aniquilación y creación son los mismos que en la deducción teórica y obedecen la misma notación que la base de Fock. Un operador solo afecta a las partículas en el estado del mismo número. Es importante ver de forma explícita la acción de los términos no diagonales. Por ejemplo, el primer término de H^0 es $-J^0(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1)$. Al aplicar a un ket arbitrario se obtiene:

$$\begin{aligned}
-J^0(b_1^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_1)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle &= -J^0[b_1^\dagger b_2|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle + b_2^\dagger b_1|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle] \\
&= -J^0[b_1^\dagger \sqrt{n_2}|n_1, n_2 - 1, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + b_2^\dagger \sqrt{n_1}|n_1 - 1, n_2, n_3, n_4 \rangle] \\
&= -J^0[\sqrt{(n_1 + 1)n_2}|n_1 + 1, n_2 - 1, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + \sqrt{n_1(n_2 + 1)}|n_1 - 1, n_2 + 1, n_3, n_4 \rangle],
\end{aligned}$$

Con este término, es muy sencillo obtener la acción correspondiente al primer término de H^1 :

$$\begin{aligned}
-J^1(b_3^\dagger b_4 + b_4^\dagger b_3)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle &= -J^1[\sqrt{(n_3 + 1)n_4}|n_1, n_2, n_3 + 1, n_4 - 1 \rangle \\
&\quad + \sqrt{n_3(n_4 + 1)}|n_1, n_2, n_3 - 1, n_4 + 1 \rangle],
\end{aligned}$$

Aplicando la misma lógica, solo es necesario ver la acción del primer término de H^{01} para expresar los términos faltantes. De forma explícita:

$$\begin{aligned}
(2\hat{n}_1\hat{n}_3 + b_1^\dagger b_1^\dagger b_3 b_3)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle &= U^{01}[2\hat{n}_1\hat{n}_3|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + b_1^\dagger b_1^\dagger b_3 b_3|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle] \\
&= U^{01}[(2n_1 n_2)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + b_1^\dagger b_1^\dagger b_3 b_3|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle] \\
&= U^{01}[(2n_1 n_2)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + \sqrt{n_3(n_3 - 1)}b_1^\dagger b_1^\dagger|n_1, n_2, n_3 - 2, n_4 \rangle] \\
&= U^{01}[(2n_1 n_2)|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle \\
&\quad + \sqrt{n_3(n_3 - 1)(n_1 + 1)(n_1 + 2)}|n_1 + 2, n_2, n_3 - 2, n_4 \rangle]
\end{aligned}$$

Los otros tres términos funcionan de manera equivalente. Los kets de la base de Fock son eigenvectores del operador número, y por ende su interacción es trivial.

2.5. Parámetros para la Matriz

Los valores de las variable J^i y U^j no son arbitrarios, aun sí no dependen necesariamente uno del otro. En el problema de una sola partícula en un potencial de doble pozo limitado a los primeros cuatro niveles de energía, los parámetros del pozo determinan las distancias entre los niveles de energía. Si se define:

$$J^0 = e_1 - e_0 \quad (2.31)$$

$$J^1 = e_3 - e_2 \quad (2.32)$$

$$\hbar\omega = e_2 - e_0 \quad (2.33)$$

En esta notación e_n representa la energía de la función de onda con n nodos. Esto indica que J^0 y J^1 están dados para cada potencial como pareja, no se pueden variar de manera independiente dado que dependen de las eigenenergías del problema de una partícula en un potencial de doble pozo. Los parámetros U^l en cambio si pueden variar de manera independiente. Para poder definir funciones de onda localizadas [16], los parámetros cumplen con:

$$J^0 \ll J^1 \ll \hbar\omega, \quad (2.34)$$

y

$$U^1 = \frac{3}{4}U^0, \quad U^{01} = \frac{1}{2}U^0. \quad (2.35)$$

En [17], se utiliza el método de Numerov [18] para resolver el problema de las primeras cuatro funciones de onda. Se resuelve el problema para el potencial $V(x) = x^8 + x^4 - ax^2$, donde $a \in \{0, 20\}$. Se escogió este potencial para justificar que la función de onda sea 0 fuera del pozo. La evolución de los niveles de energía en función del parámetro a se ilustra en la figura 2.1:

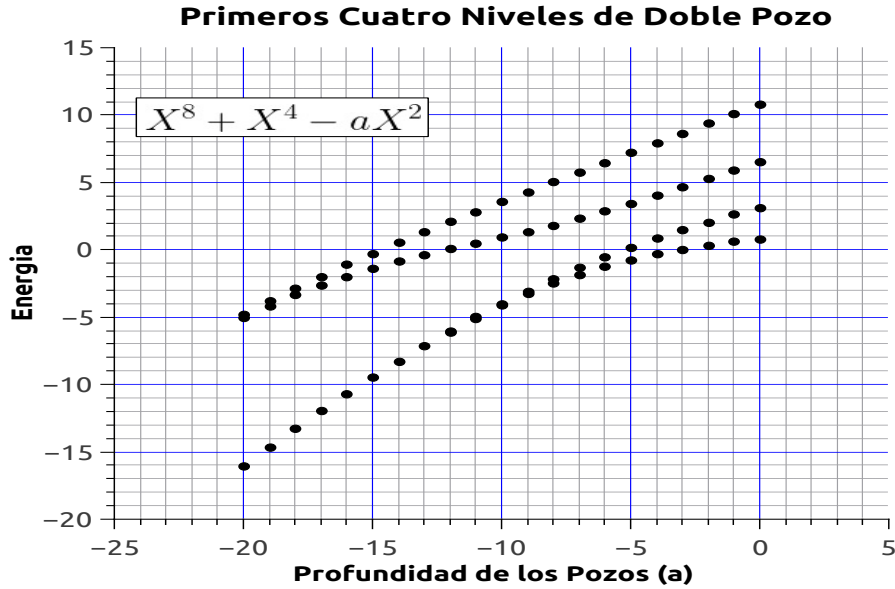


Figura 2.1: e_1, e_2, e_3, e_4 vs a . Niveles de energía de la funciones de onda correspondientes al doble pozo.

Utilizando los criterios anteriores, se determina usar el potencial donde $a = 20$. Con este potencial, se obtienen las siguientes funciones de onda, utilizando el método de Numerov:

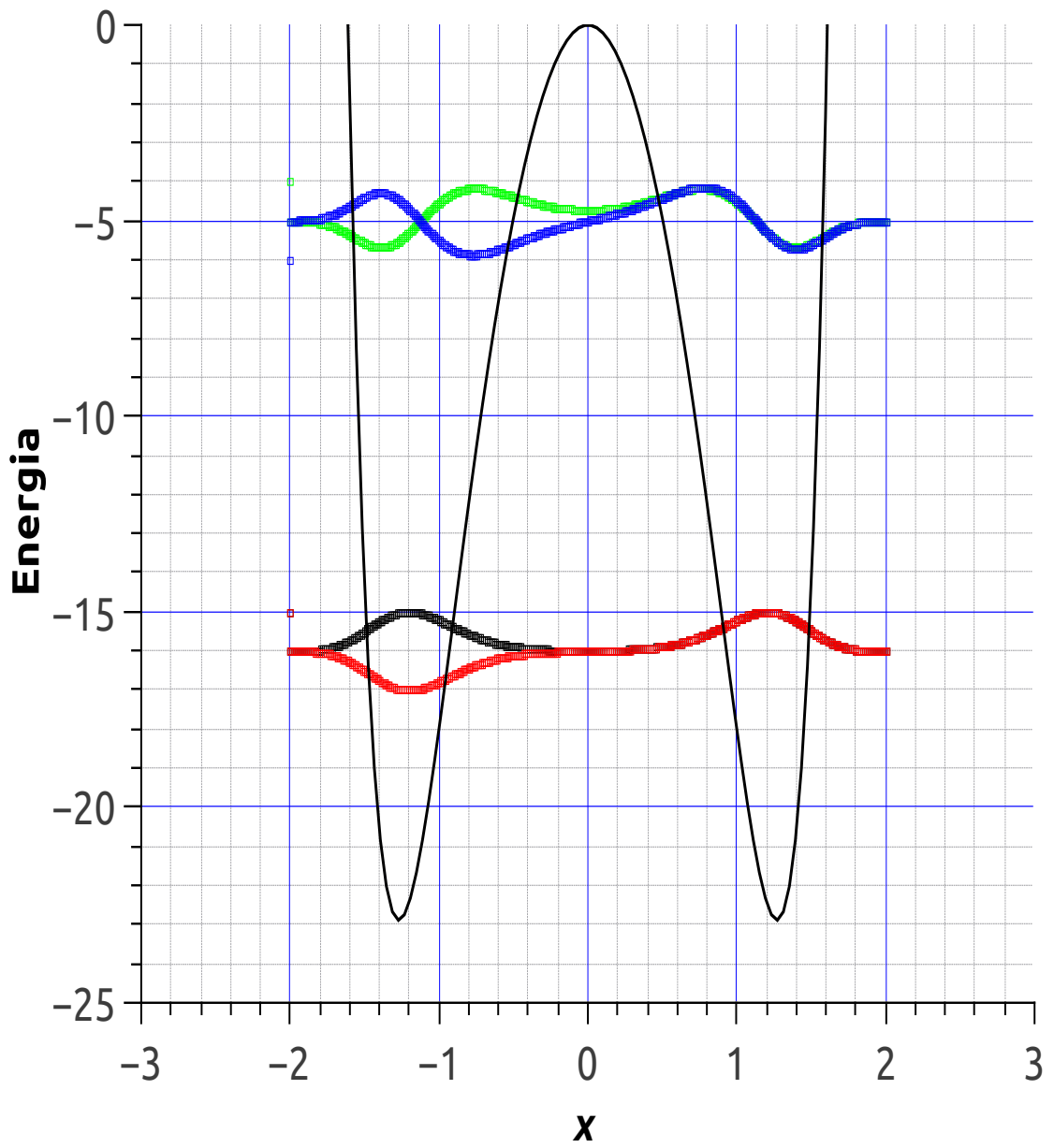


Figura 2.2: Primeras cuatro funciones de onda para el potencial de doble pozo. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$

Estas funciones de onda se combinan para crear las funciones de onda localizadas que se utilizan en la segunda cuantización

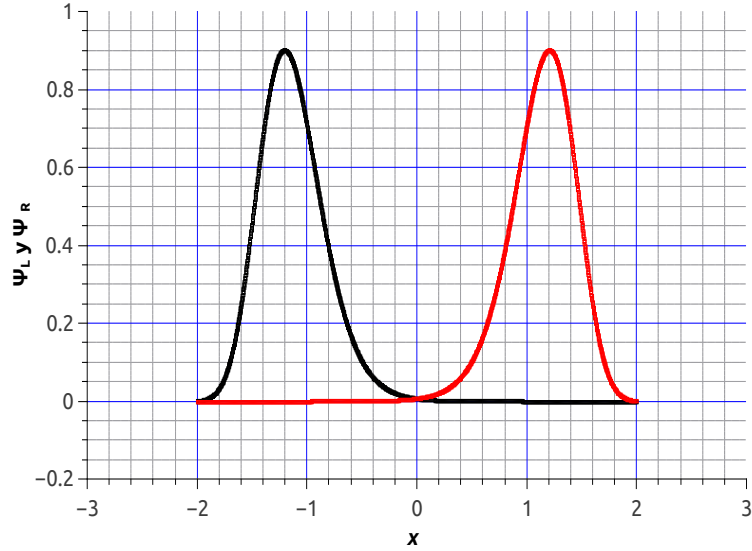


Figura 2.3: Primeras dos funciones de onda localizadas para el potencial de doble pozo. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$

Las combinaciones para las funciones de onda localizadas son [19]:

$$\begin{aligned}\Psi_L^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2) \\ \Psi_R^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2) \\ \Psi_L^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_3 + \phi_4) \\ \Psi_R^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_3 - \phi_4).\end{aligned}$$

Las funciones Ψ son localizadas, las funciones ϕ no lo son. Utilizar la base de funciones localizadas con el potencial antes mencionado *necesariamente* amarra los parámetros del Hamiltoniano:

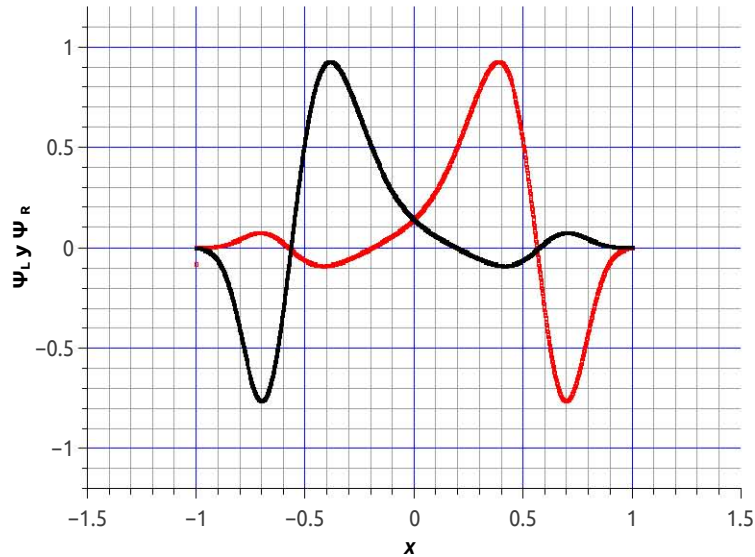


Figura 2.4: Siguietes dos funciones de onda para el potencial de doble pozo. Las líneas indican los centros de los pozos. $V(x) = x^8 + x^4 - 20x^2$

$$\begin{aligned}
 J^0 &= 0,0012 \\
 J^1 &= 0,2548 \\
 \hbar\omega &= 11,128
 \end{aligned}$$

Estos valores son producto directo de la elección de potencial y no pueden variarse de manera independiente. Se puede controlar el número de partículas y la interacción. También debe limitarse la interacción a manera de evitar el cruce de eigenvalores [16]. Esto se analiza obteniendo los eigenvalores correspondientes a un rango de valores de U . Si se grafican todos los valores obtenidos, el resultado es el siguiente:

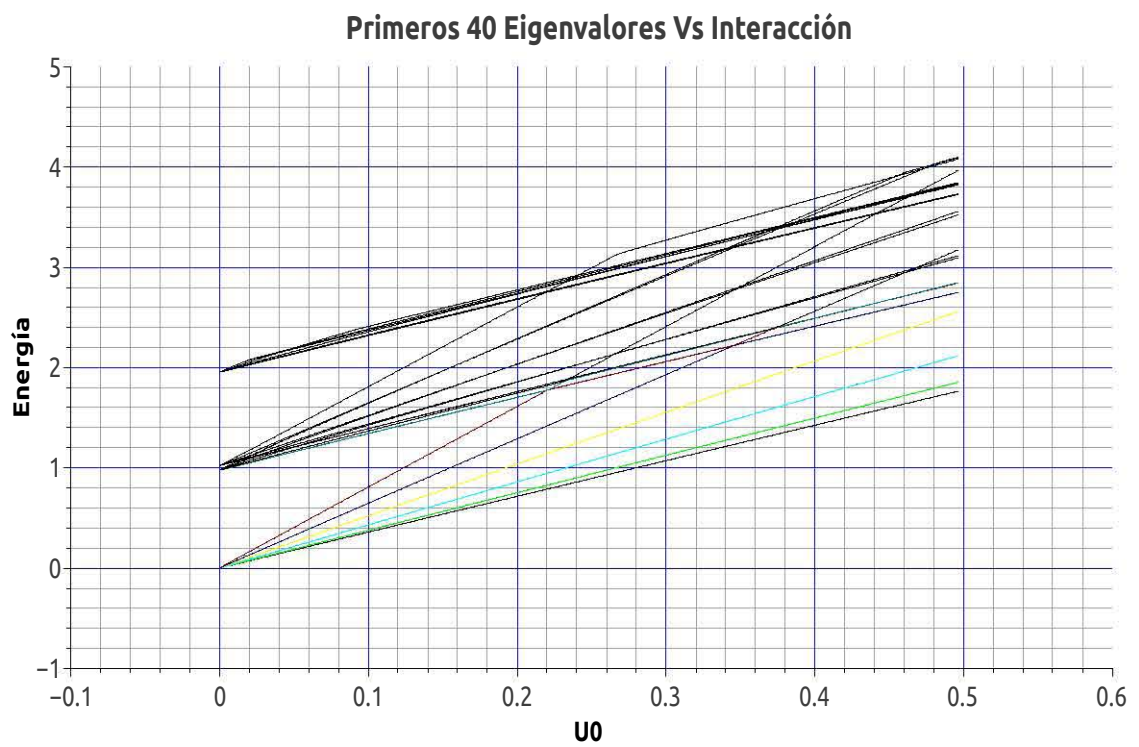


Figura 2.5: Primeros 40 eigenvalores contra el valor de la interacción. La energía se normaliza al valor de $\hbar\Omega$. La línea superior que cambia su pendiente de forma repentina indica un cruce de eigenvalores.

Puede apreciarse que los eigenvalores comienzan agrupados y luego se dispersan linealmente conforme aumenta el valor de la interacción. El valor de U para el cual se cruzan las líneas indica que los eigenvalores que inician en un cierto grupo cuando $U = 0$ comienzan a cruzar el valor de eigenvalores que inician en uno de los grupos aledaños. El cruce de eigenvalores señala que se debe trabajar en una aproximación con más niveles de energía si se desea utilizar una interacción cercana a la de este punto.

Capítulo 3

Estados Estacionarios

Antes de analizar el comportamiento dinámico del sistema, se analiza el comportamiento de sus estados estacionarios. Si el Hamiltoniano depende en este caso de U y de N , entonces existen Ω eigenvectores tales que [20]:

$$H(U, N)|\phi_n(U, N)\rangle = \epsilon_n|\phi_n(U, N)\rangle. \quad (3.1)$$

Si se define al operador \hat{N}_L como:

$$\hat{N}_L = \hat{n}_1 + \hat{n}_3. \quad (3.2)$$

Entonces se generan los valores:

$$\langle \hat{N}_L \rangle = \langle \phi_n(U, N) | \hat{N}_L | \phi_n(U, N) \rangle. \quad (3.3)$$

Para cada eigenvector correspondiente al Hamiltoniano. Vale la pena recordar el valor de $\Omega: \frac{(N+1)(N+2)(N+3)}{6}$. Se analiza el valor de expectación del operador número correspondiente al pozo izquierdo para todos los eigenvectores del Hamiltoniano en función de los eigenvalores correspondientes. Se analiza el efecto del número de partículas al trabajar con $N = 20$ y $N = 40$ y del valor del parámetro de interacción, utilizando $U = 0,001, 0,01, 0,1$. Cada conjunto de gráficas contiene los tres valores de el parámetro U , los cuales son los mismos que se utilizan en el capítulo 4 para realizar la evolución temporal.

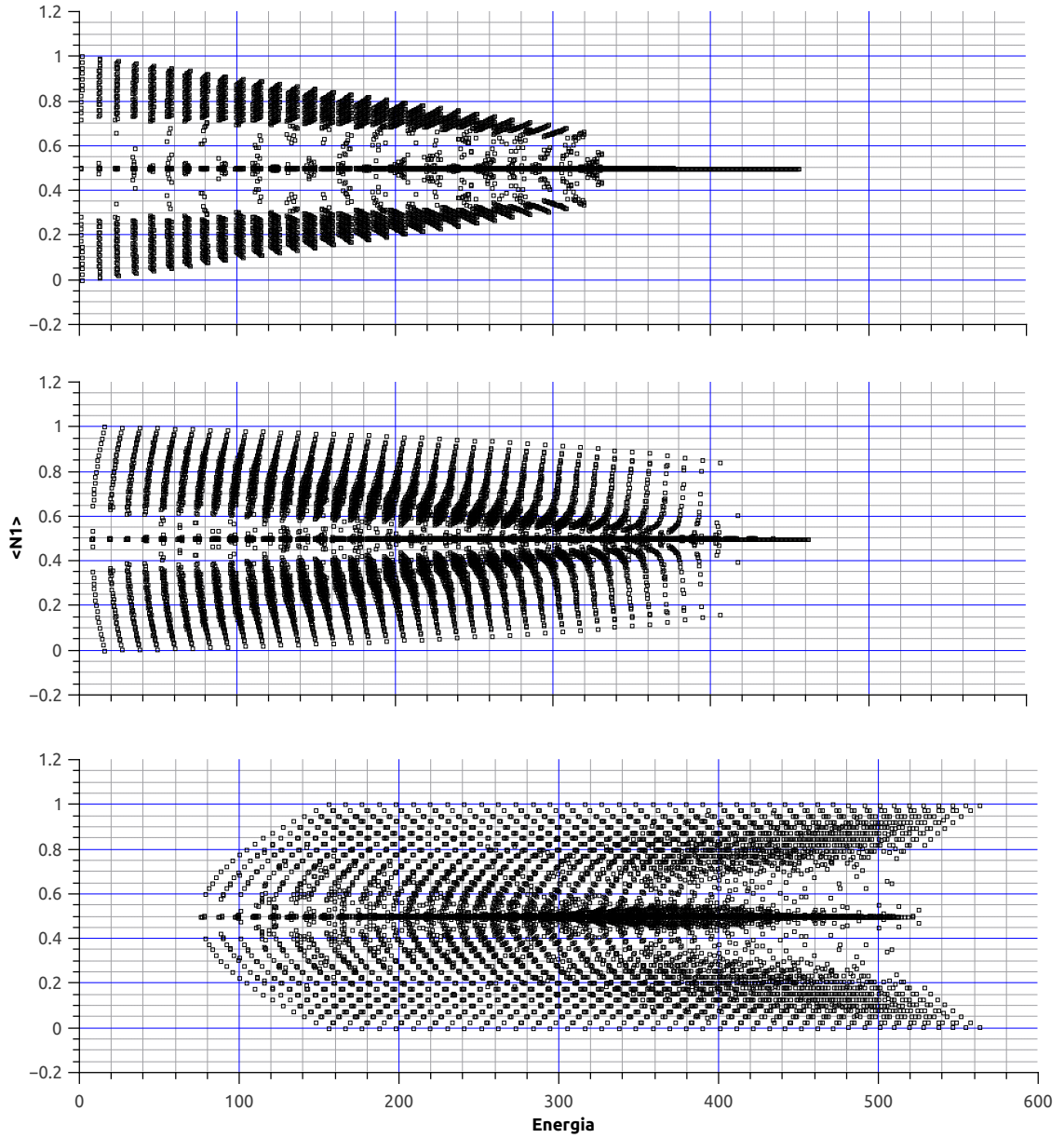


Figura 3.1: Valor de expectación del operador \hat{N}_L para 40 partículas para todos los eigenvectores en función de su eigenvalor correspondiente. $U = 0,001,0,01,0,1$

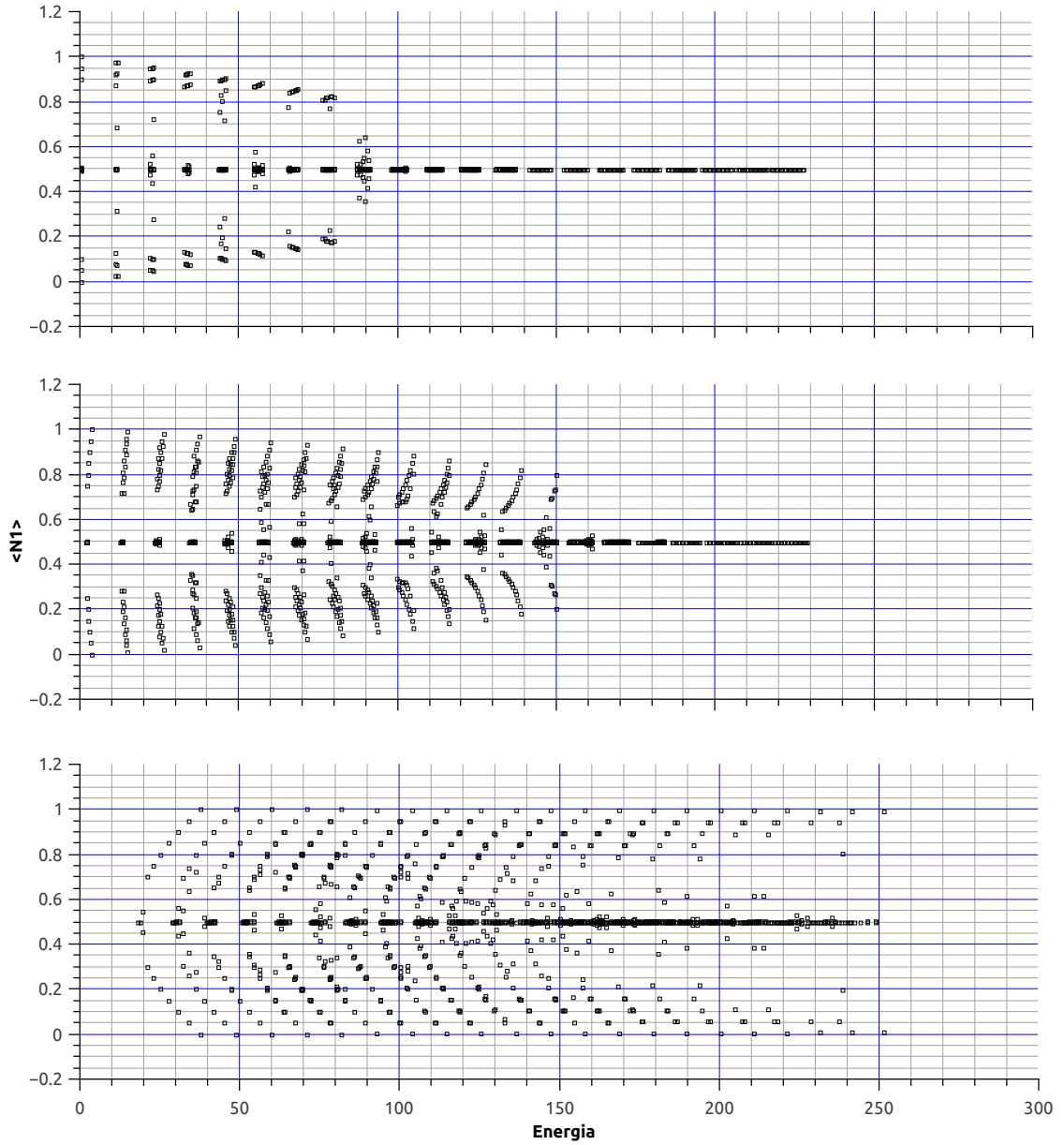


Figura 3.2: Valor de expectación del operador \hat{N}_L para 20 partículas para todos los eigenvectores en función de su eigenvalor correspondiente. $U = 0,001,0,01,0,1$

Las gráficas muestran cualitativamente el mismo comportamiento independientemente del número de partículas. Esto es, si bien es cierto que el valor de expectación de partículas en el pozo 1 tiene mas puntos para el caso en el que $N = 40$, que el caso en el que $N = 20$, se desprende la misma información, para un valor fijo de la interacción. Dado que el tamaño del espacio de Fock crece como N^3 en la aproximación de dos bandas y dado que el Hamiltoniano crece como N^6 es justificable realizar la evolución temporal para el caso de 20 partículas, esto se debe al tiempo de cómputo como se observa en el apéndice A. Puede apreciarse la diferencia en el comportamiento del sistema una vez se utilizan valores de interacción cercanos al punto de cruce de eigenvalores mostrado en la figura 2.5. En el caso de baja interacción ($U = 0,001$) los estados correspondientes a baja energía corresponden a varios valores posibles de expectación para el operador número \hat{N}_L . Conforme aumenta la energía, los posibles valores de expectación del operador número se reducen y en las más altas energías solo es posible obtener el valor de 0.5. Al aumentar la interacción, se observa que los eigenvalores del sistema se desplazan hacia más altas energías, los eigenvalores más altos dejan de corresponder únicamente a valor de expectación de 0.5, (como puede observarse en la figura 3.1). En resumen, se observa un mayor número de estados autoatrapados (aquellos estados en los que el valor de expectación es diferente de 0.5) a medida que la interacción aumenta. Dicho resultado coincide con el que se obtiene al estudiar el sistema de dos pozos en la aproximación de una sola banda.

Capítulo 4

Comportamiento Dinámico

Para obtener la función de onda $|\Psi(t)\rangle$ se utiliza el hecho de que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo[20]:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle. \quad (4.1)$$

Puede escribirse de la siguiente forma:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle. \quad (4.2)$$

Con esta forma de la ecuación, es posible tomar una condición inicial dada en la base de Fock y obtener la función de onda para cualquier tiempo t . El operador aplicado a $|\Psi(0)\rangle$ se conoce como operador evolución. Para poder traducir la ecuación a un programa, es necesario expresar $|\Psi(0)\rangle$ en la base de eigenvectores de \hat{H} . Si se expresa a $|\Psi(t)\rangle$ como:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n^{\Omega} C_n |\phi_n\rangle, \quad (4.3)$$

donde:

$$C_n = \langle \phi_n | \Psi(0) \rangle. \quad (4.4)$$

Las $|\phi\rangle$ representan los eigenvectores de \hat{H} . Con $|\Psi\rangle$ expresada de esta forma, la ecuación se convierte en:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n^{\Omega} C_n e^{-\frac{i}{\hbar}e_n t} |\phi_n\rangle. \quad (4.5)$$

El programa detallado en el Apéndice E convierte una condición inicial en la base de Fock a la base de eigenvectores y obtiene el valor de la función

de onda para cada valor del tiempo. Luego calcula el valor de expectación del operador número normalizado, correspondiente al pozo izquierdo para cada valor del tiempo. La información se ordena de acuerdo a la condición inicial y a la interacción. Se dividen las condiciones iniciales en tres categorías distintas. Todos los cálculos dinámicos se realizaron con 20 partículas por consideraciones de tiempo de computo, como se observa en el apéndice A. En todos los casos se utilizan unidades de tiempo tales que $\hbar = 1$.

- **Pozo Vacío:** $|0, n_2, 0, n_4 \rangle$ El pozo 1 se encuentra inicialmente vacío, las partículas se encuentran distribuidas en el pozo 2. Se encuentran todas en el estado base, en el estado excitado y divididas de igual forma entre ambos estados.
- **Pozo Lleno** $|n_1, 0, n_3, 0 \rangle$ Las partículas se encuentran todas en el pozo 1 siguiendo con los mismos casos que en el régimen anterior.
- **Pozo Simétrico** $|n_1, n_2, n_3, n_4 \rangle$ Las partículas se encuentran en igual número en ambos pozos, con todas las combinaciones posibles de estados.

Para cada condición inicial, se realiza la evolución para tres valores distintos de interacción: 0.001, 0.01 y 0.1.

4.1. Pozo Vacío

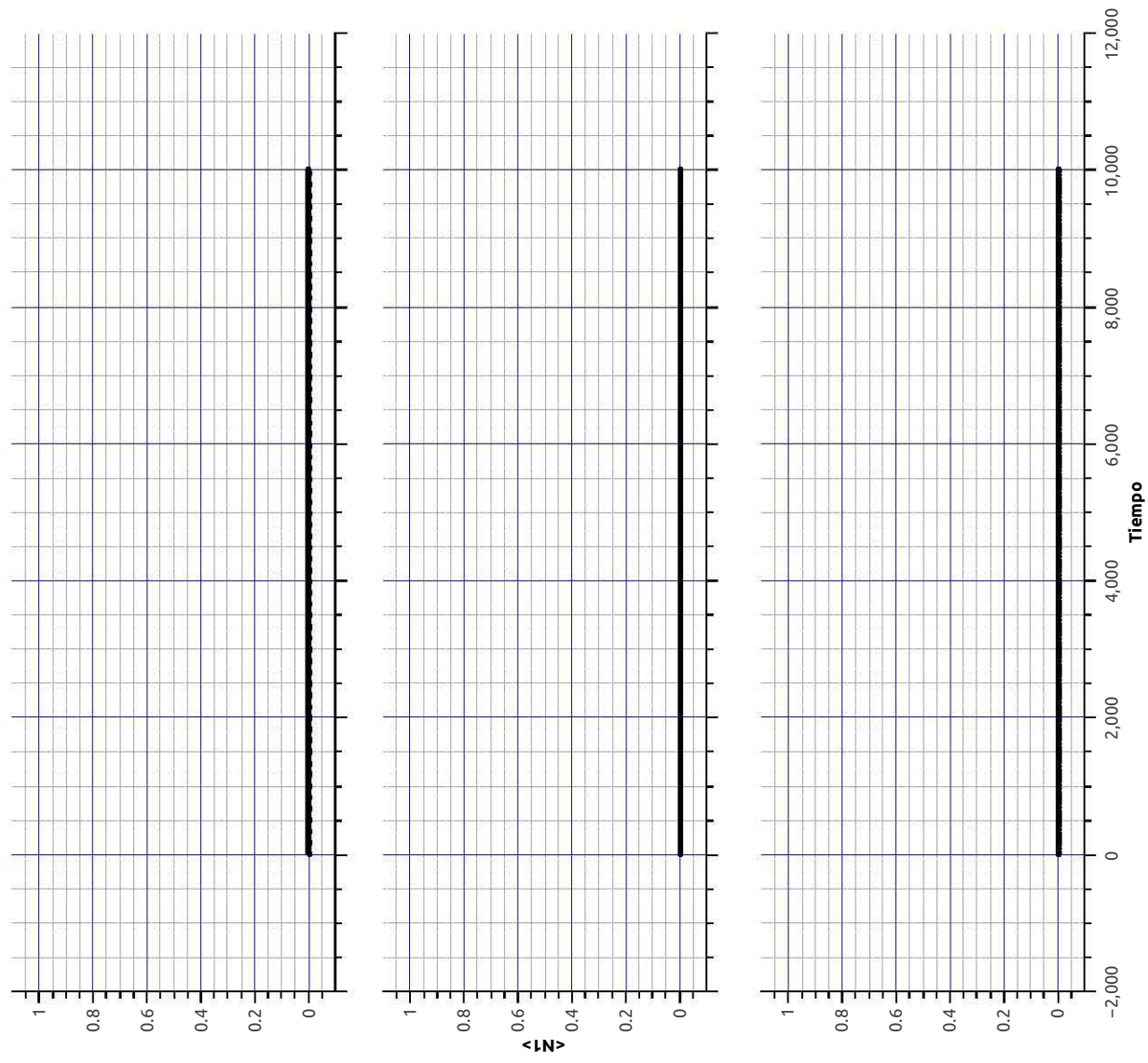


Figura 4.1: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

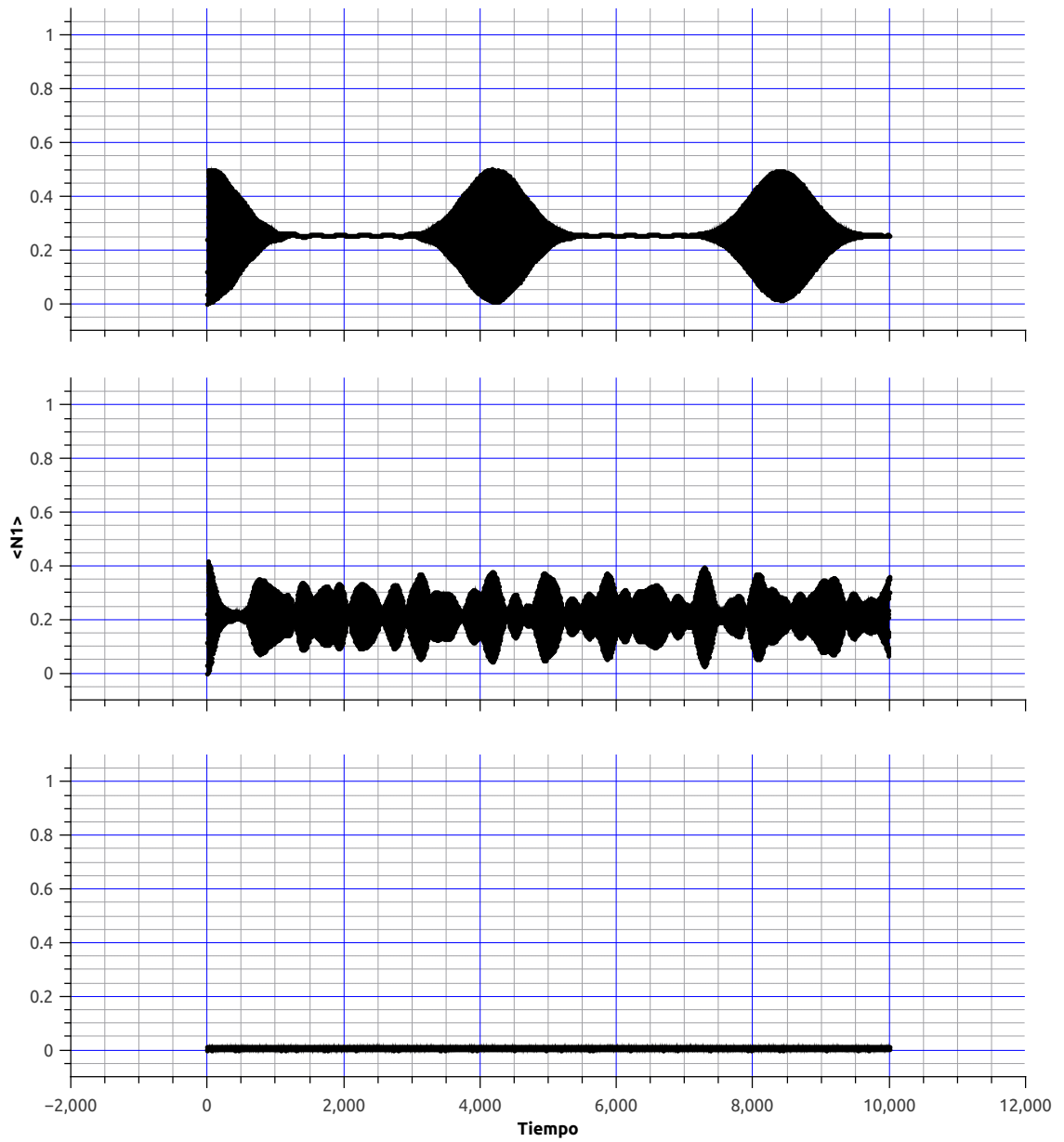


Figura 4.2: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

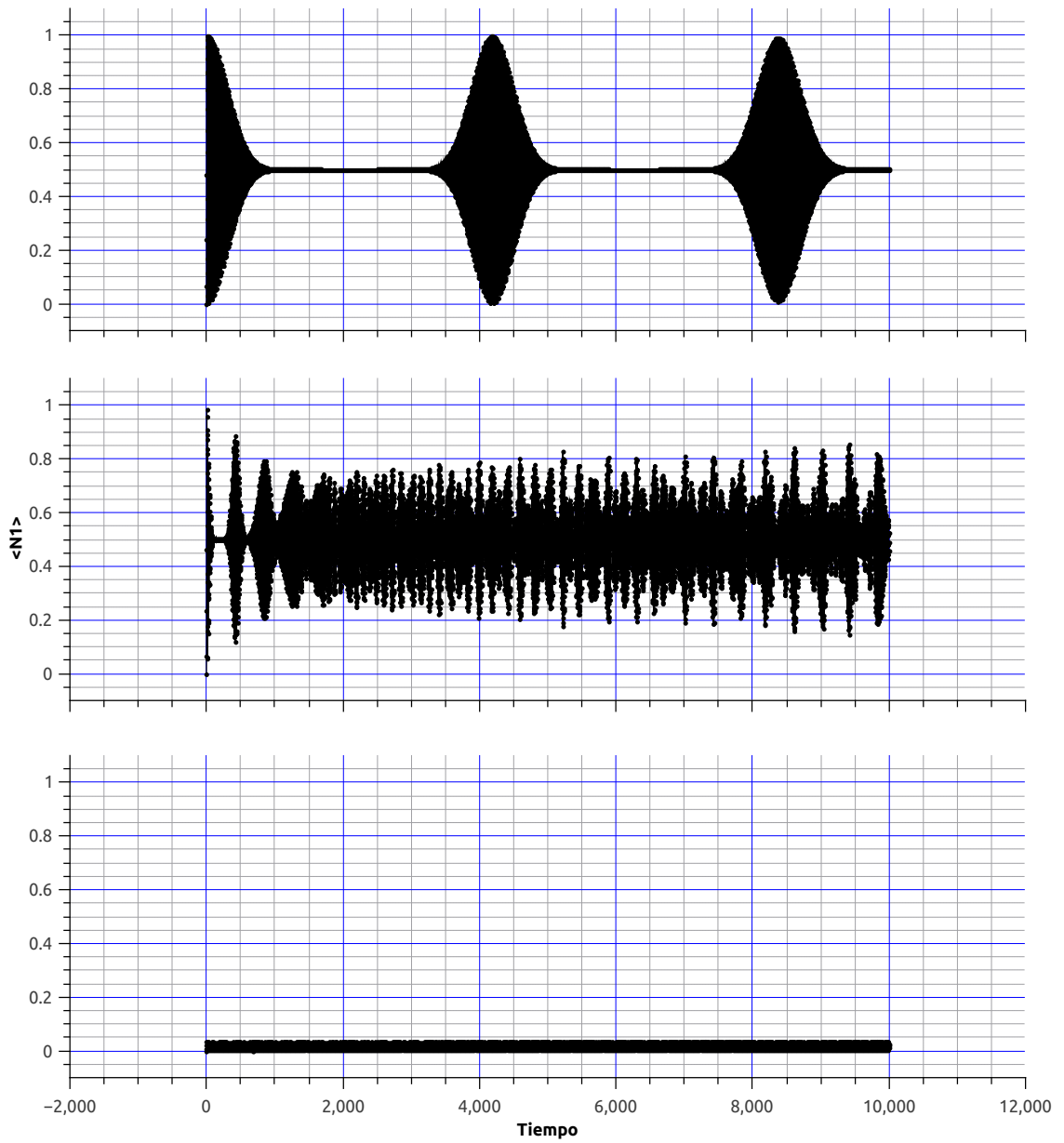


Figura 4.3: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_4 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

4.2. Pozo Lleno

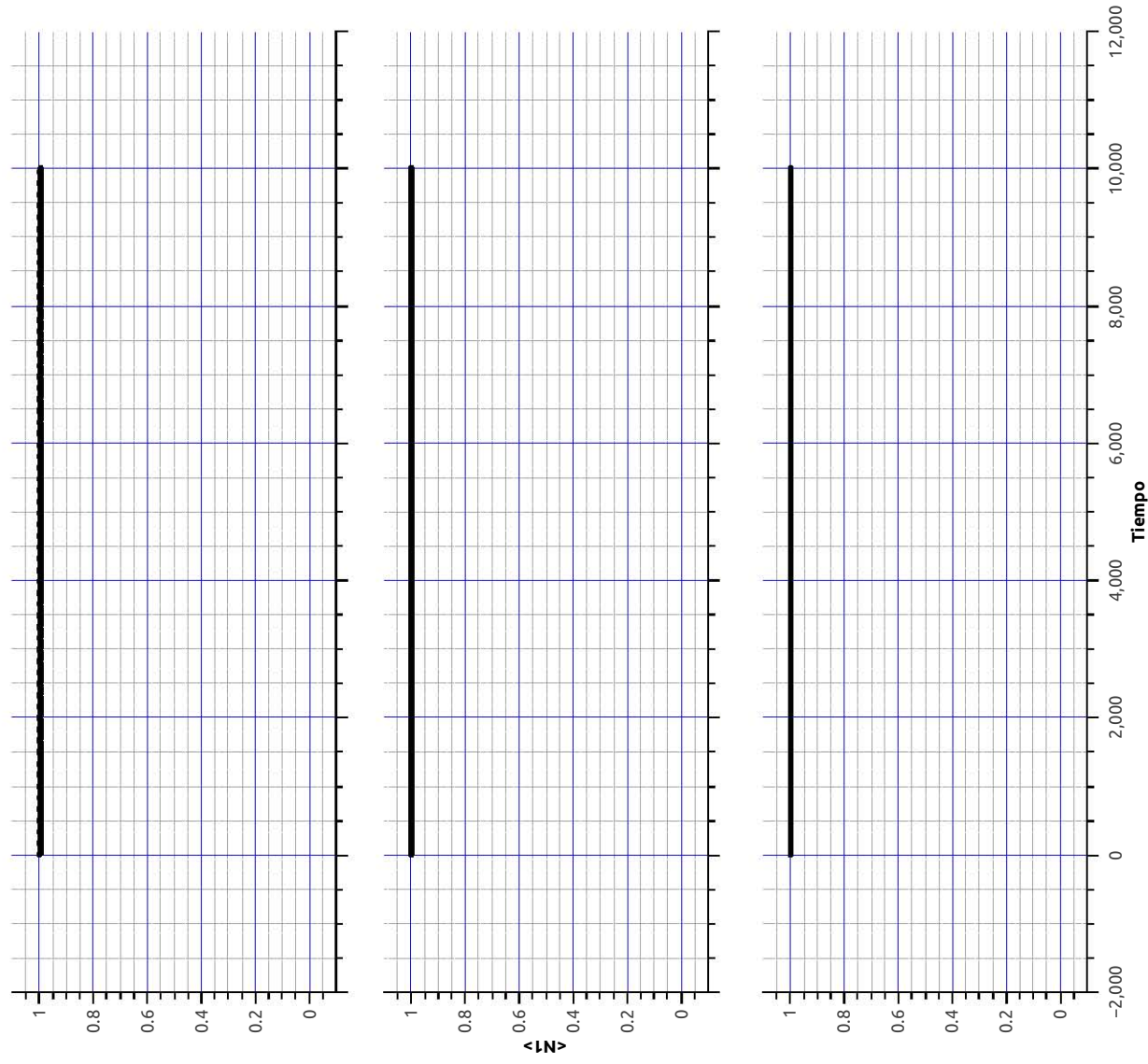


Figura 4.4: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 20$. $U_0 = 0.001$, 0.01 , 0.1

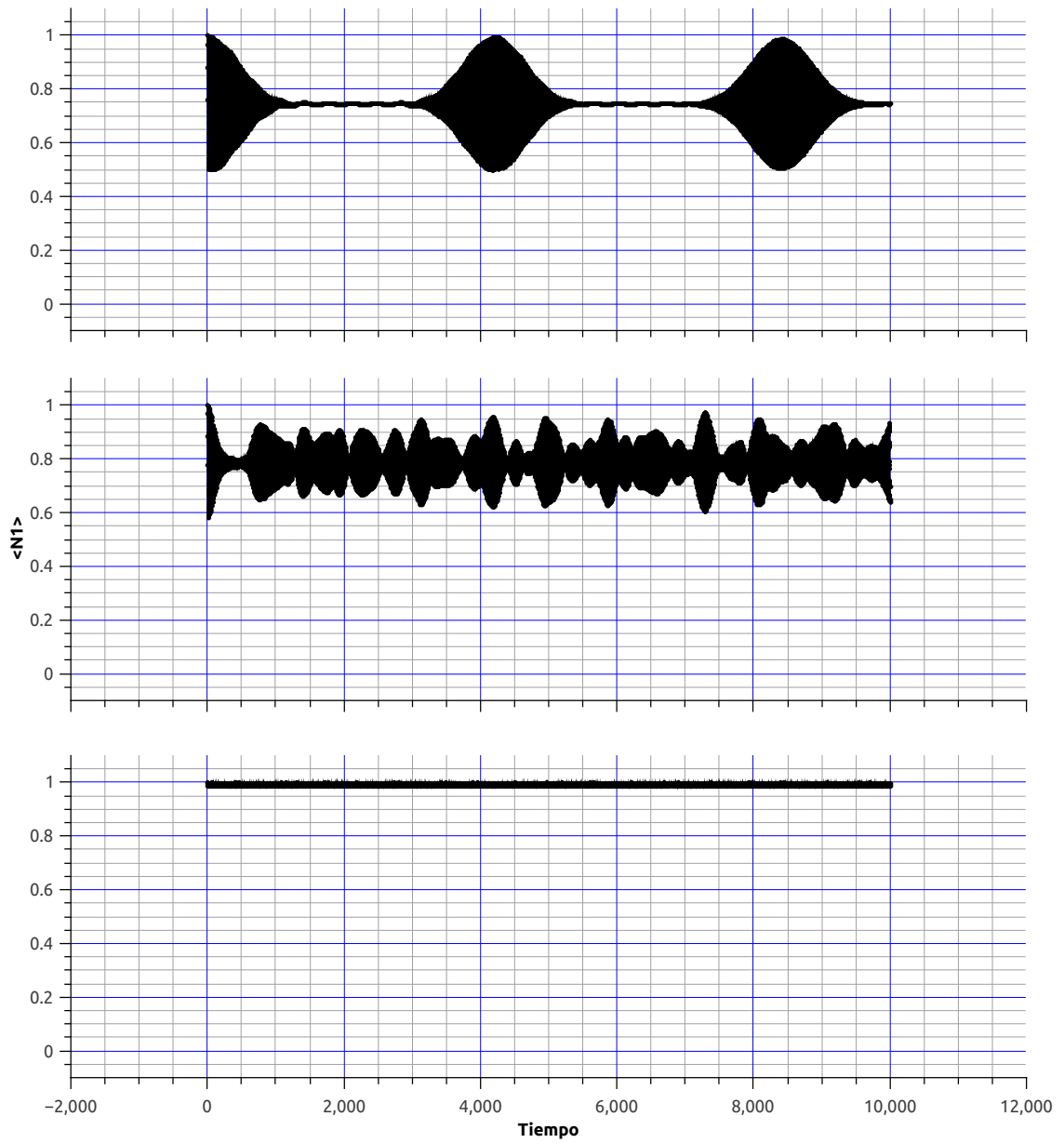


Figura 4.5: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10, n_3 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

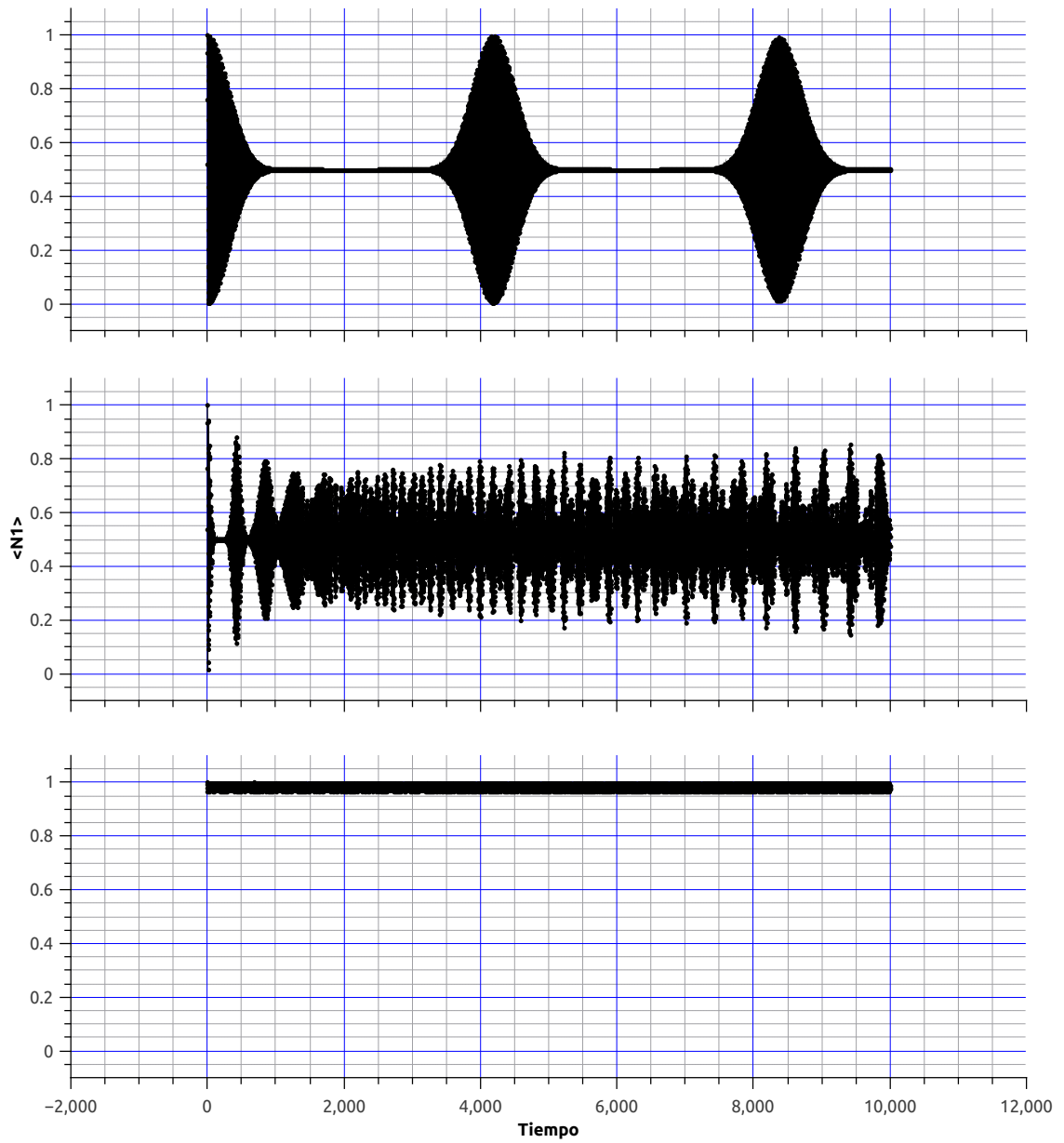


Figura 4.6: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_3 = 20$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

4.3. Pozo Simétrico

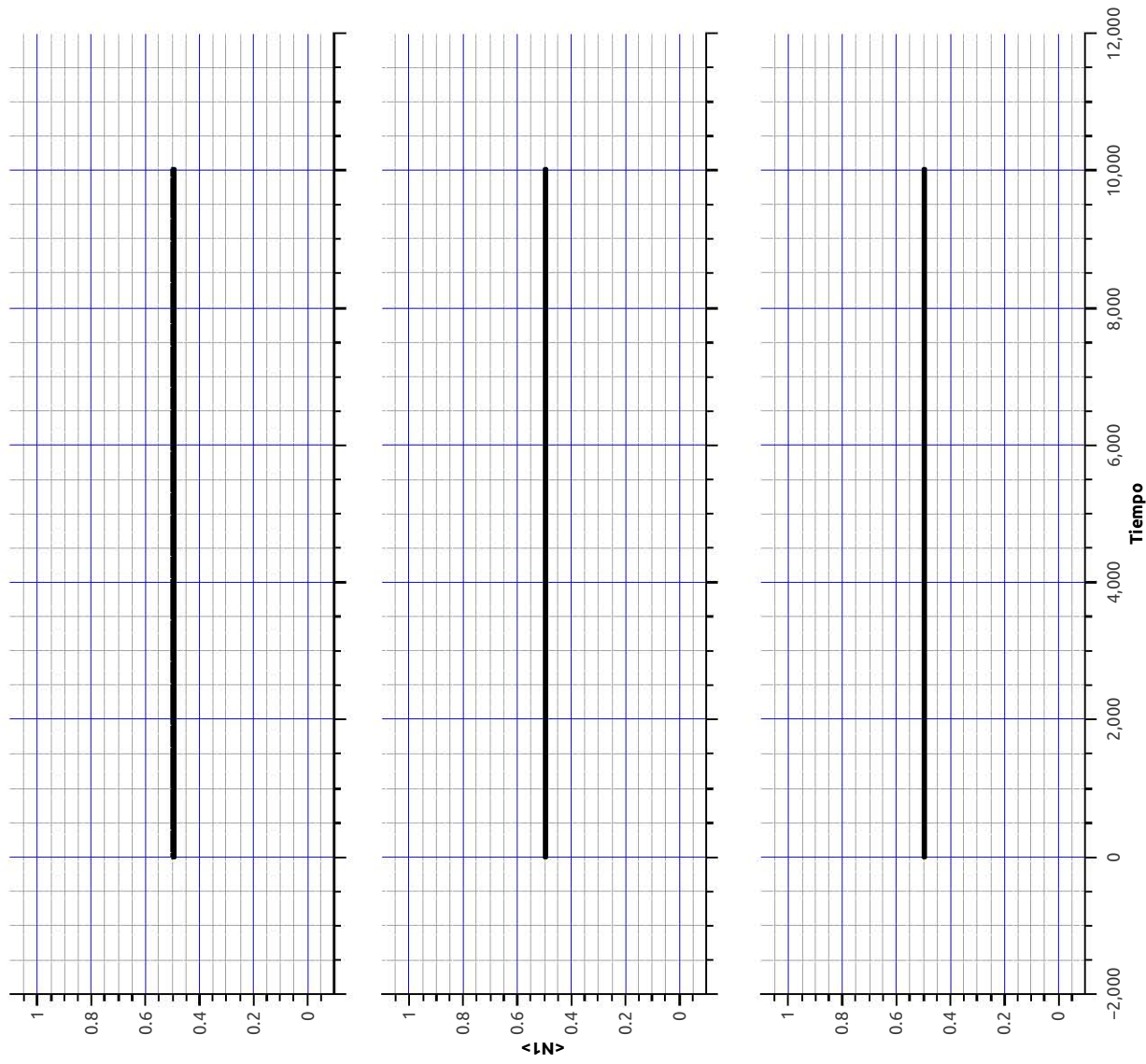


Figura 4.7: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10$, $n_2 = 10$. $U_0 = 0.001$, 0.01 , 0.1

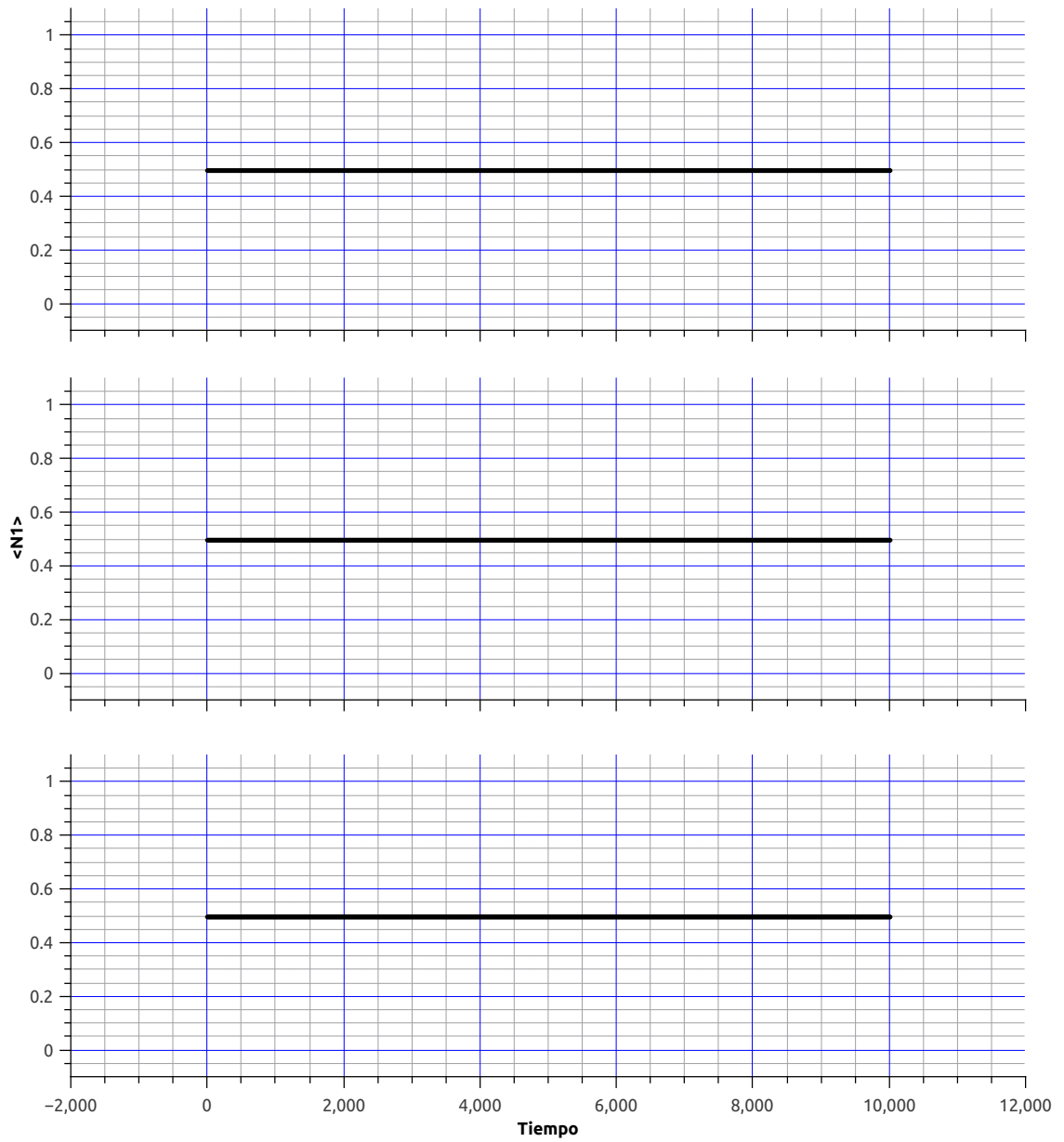


Figura 4.8: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_3 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

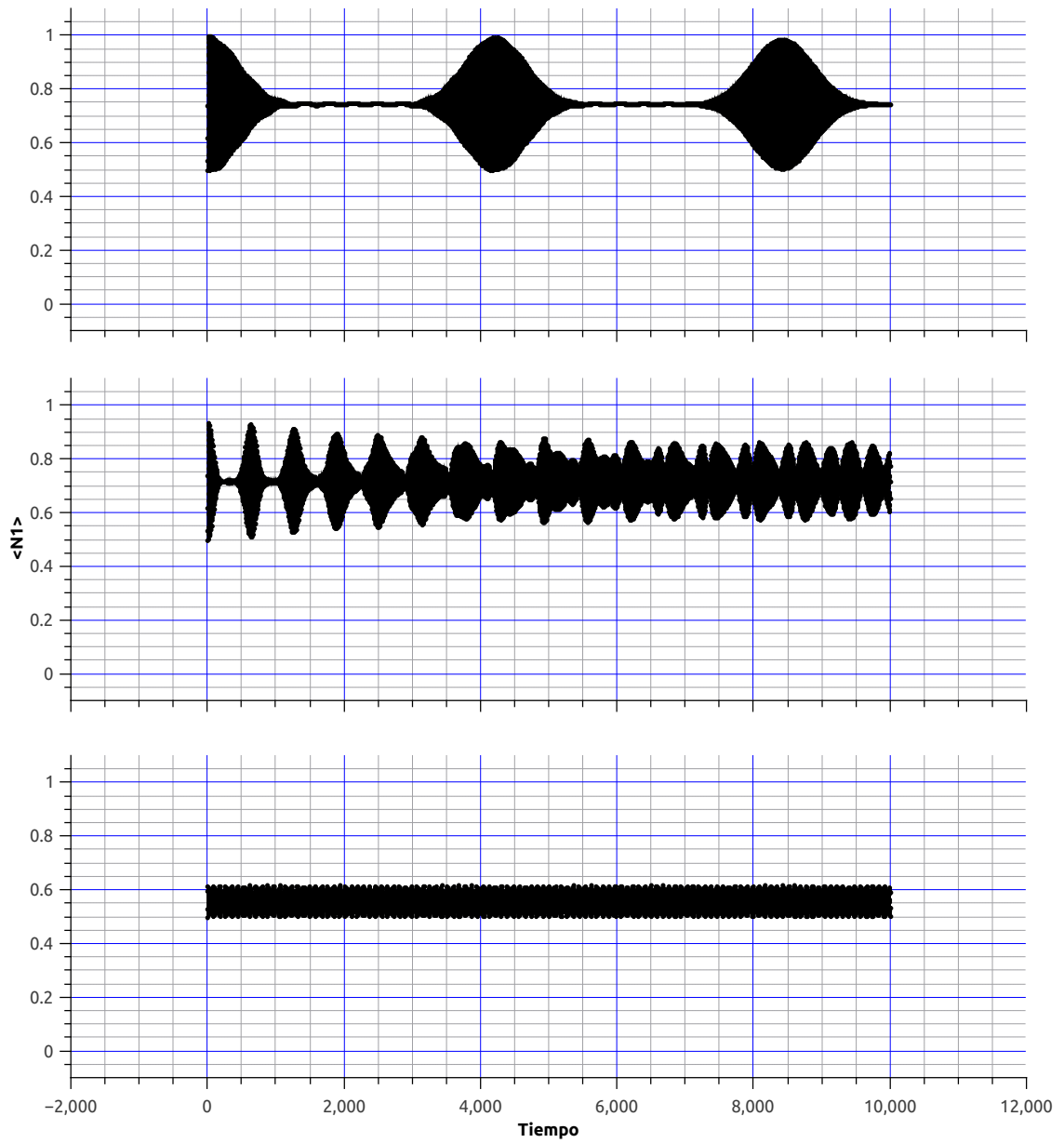


Figura 4.9: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_1 = 10, n_4 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

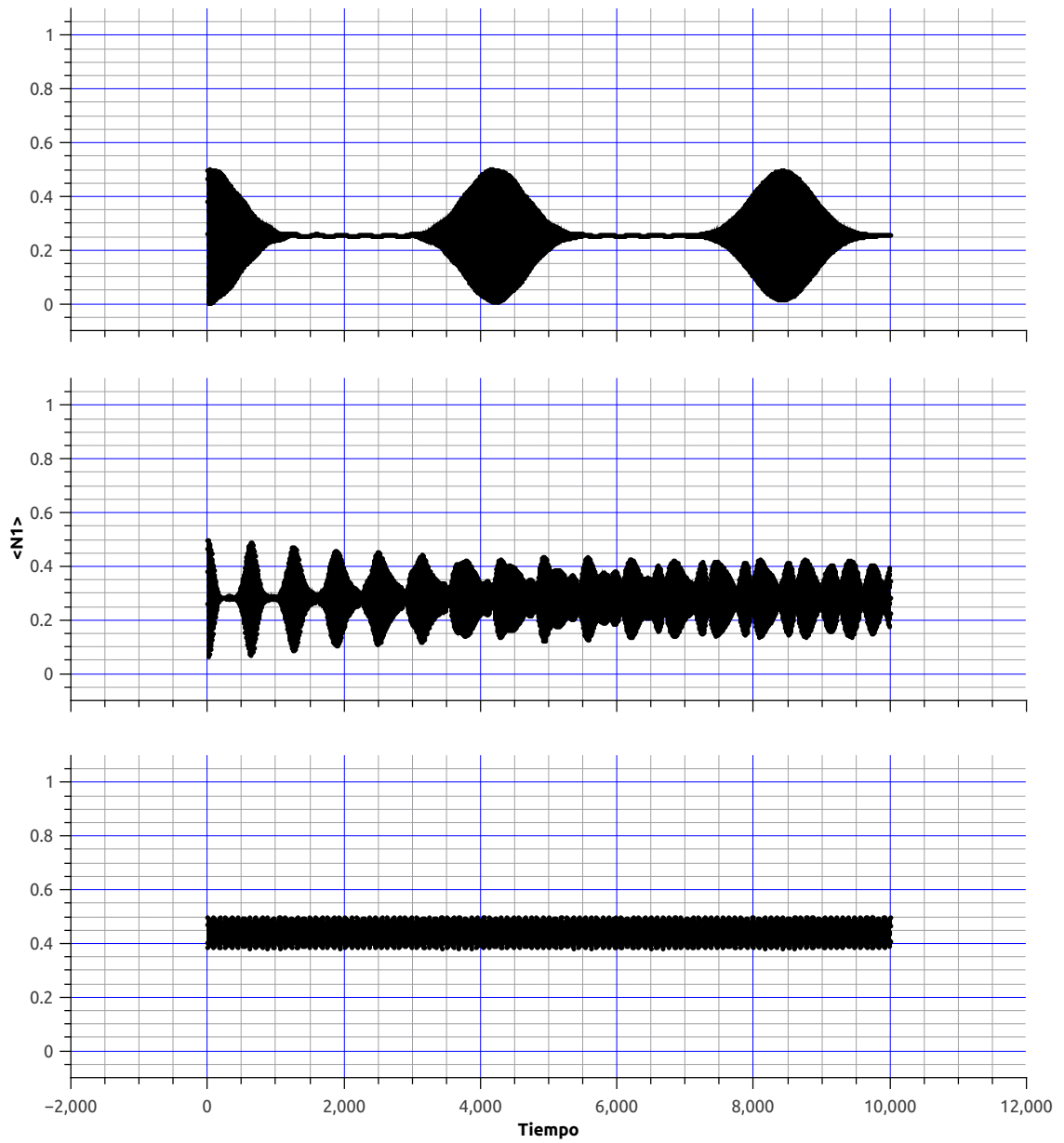


Figura 4.10: Valor de expectación de la población pozo 1 vs tiempo en unidades de 500 iteraciones. Condición inicial $n_2 = 10, n_3 = 10$. $U_0 = 0.001, 0.01, 0.1$

4.3.1. Análisis

Posiblemente el fenómeno más interesante que se observa es que el tunelaje se ve fuertemente afectado para ciertos valores de U . Esto se debe a la relación entre las energías de tunelaje J^i y el parámetro de interacción, lo cual se observa en la sección 4.4. Se observa que el tunelaje del sistema desaparece conforme se incrementa el valor del parámetro de interacción y las partículas entran en un régimen de auto-atrapamiento. Cuando todas las partículas se encuentran en uno de los dos estados base, n_1 y n_2 , no existe un intercambio significativo de partículas entre ambos pozos, esto solo sucede para los casos donde hay un número importante de partículas en los estados excitados. En estos casos, las partículas parecen compartirse de manera simétrica entre ambos pozos, alternando entre estados de alta variación en la población del pozo donde todas las partículas cambian de pozo y estados semi-estacionarios donde las partículas se dividen de manera igual entre ambos estados excitados y las oscilaciones en la población de los pozos se reducen a un mínimo. Se analiza el tiempo que el sistema pasa en cada uno de estos estados en el capítulo 5. Para poder explicar la ausencia de este comportamiento en el caso de los estados no excitados, se analiza la dinámica del problema calculando la población individual de cada estado.

4.4. Dinámica de estados separados

En la sección anterior se analizó la población de un pozo, en esta sección se analizará la población de los cuatro estados posibles de manera individual. El análisis se enfocará únicamente en el régimen de baja interacción, $U_0 = 0,001$. En el eje izquierdo se muestra la condición inicial utilizada en cada caso.

4.4.1. Pozo Lleno

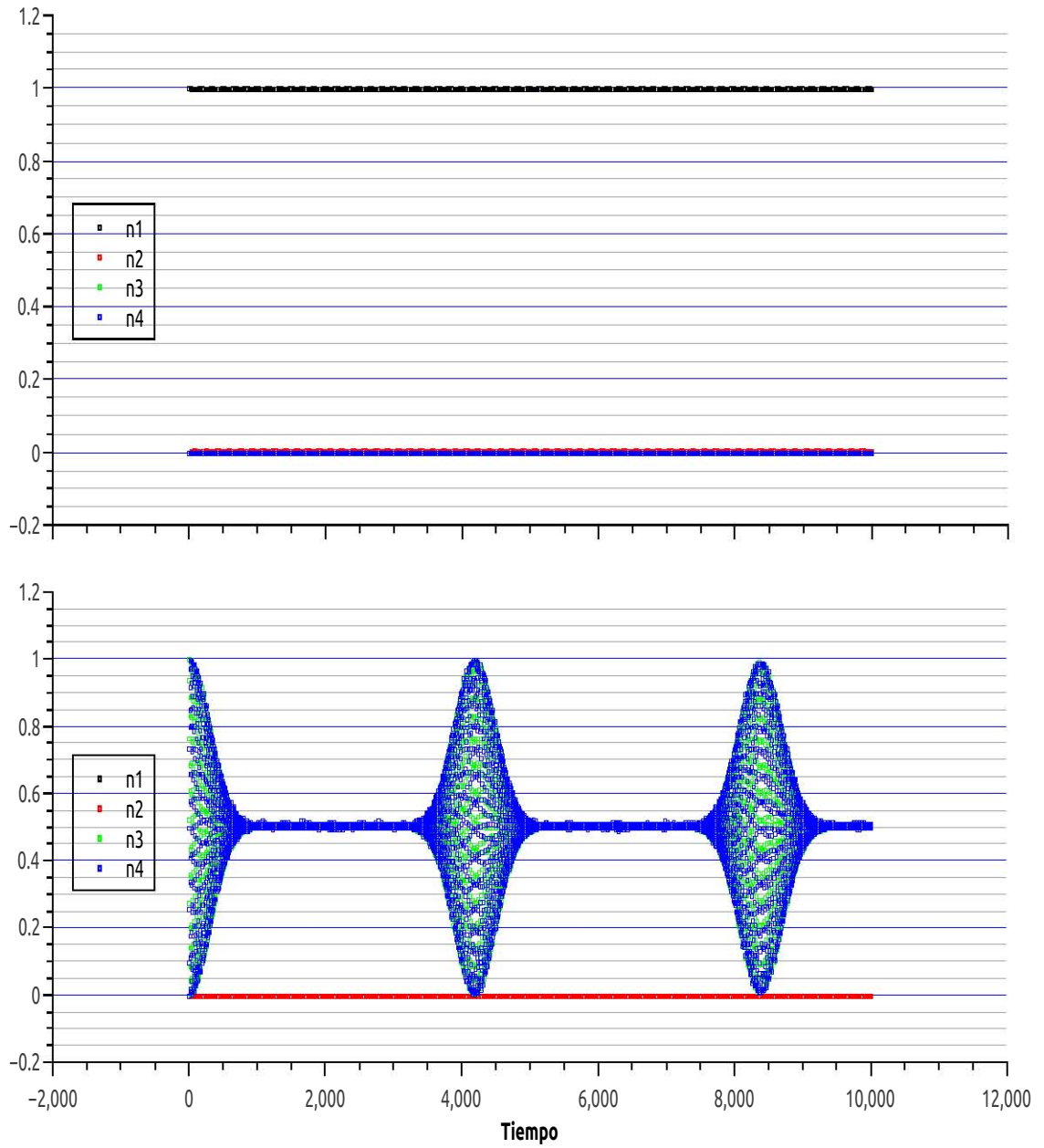


Figura 4.11: Comportamiento de estados individuales en el régimen de pozo lleno.

4.4.2. Pozo Vacío

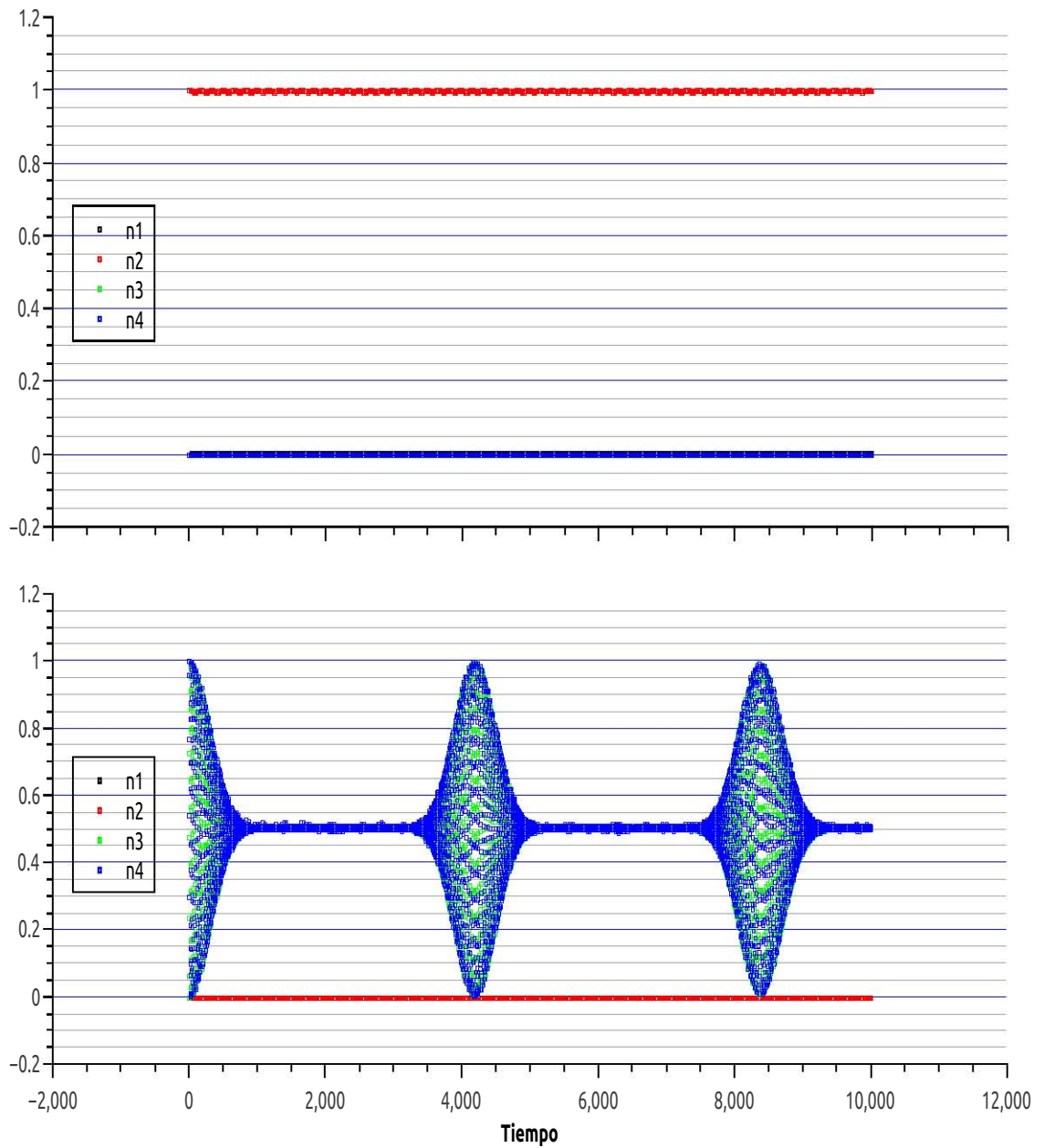


Figura 4.12: Comportamiento de estados individuales en el régimen de pozo vacío.

4.5. Análisis

Es interesante notar la diferencia en actividad entre las partículas en el nivel excitado y las que se encuentran en el estado base. Se puede observar en las funciones de onda localizadas que las funciones de onda correspondientes a los dos estados base tienen un traslape muy pequeño, lo cual explica la ausencia de transporte para esta banda. Es de interés analizar si el número de partículas o la intensidad de la interacción tienen un efecto apreciable sobre el fenómeno. Primero se presentan gráficas que muestran el cambio en movimiento en función de N . Se analizan los casos de 5,10,20 y 40 partículas. Luego, se regresa al caso de $N = 20$ y se analizan los casos adicionales de $U_0 = 0,0001$ y $0,00001$. En todos los casos la condición inicial es la del pozo lleno, se contrastan los casos $|N, 0, 0, 0 \rangle$ y $|0, 0, N, 0 \rangle$

4.5.1. Variación de N

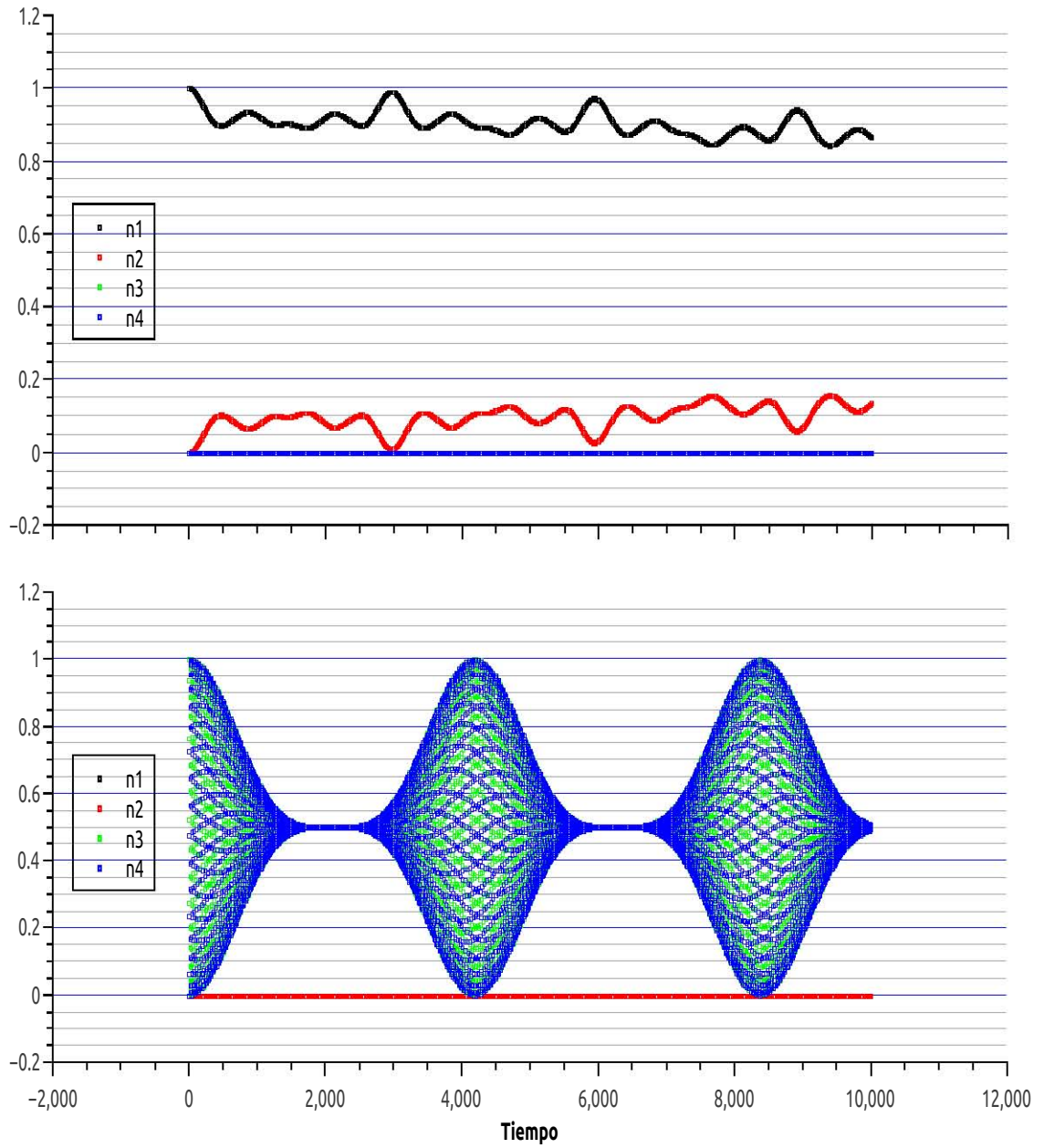


Figura 4.13: $N=5$, $U_0 = 0,001$

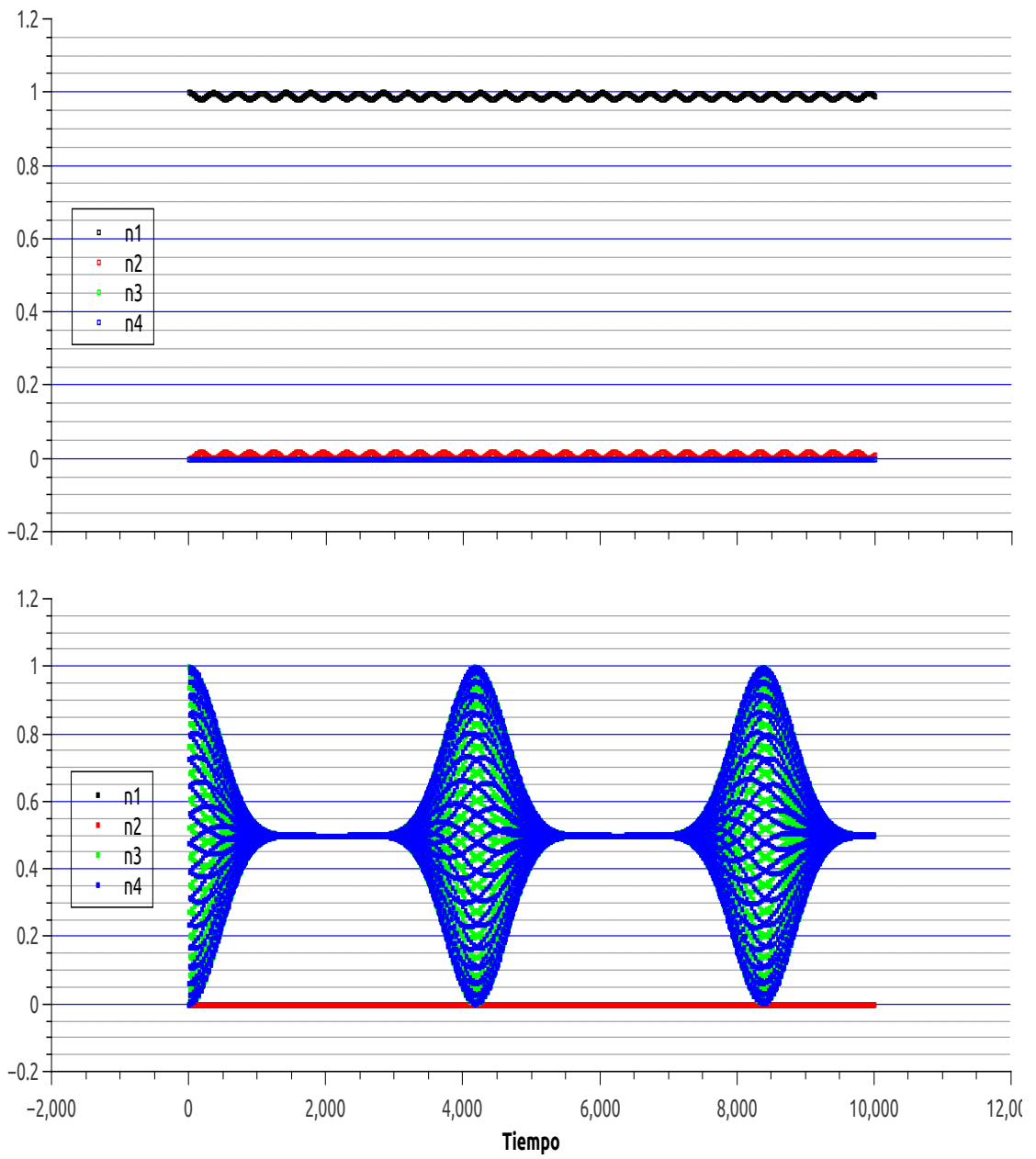


Figura 4.14: $N=10$, $U_0 = 0,001$

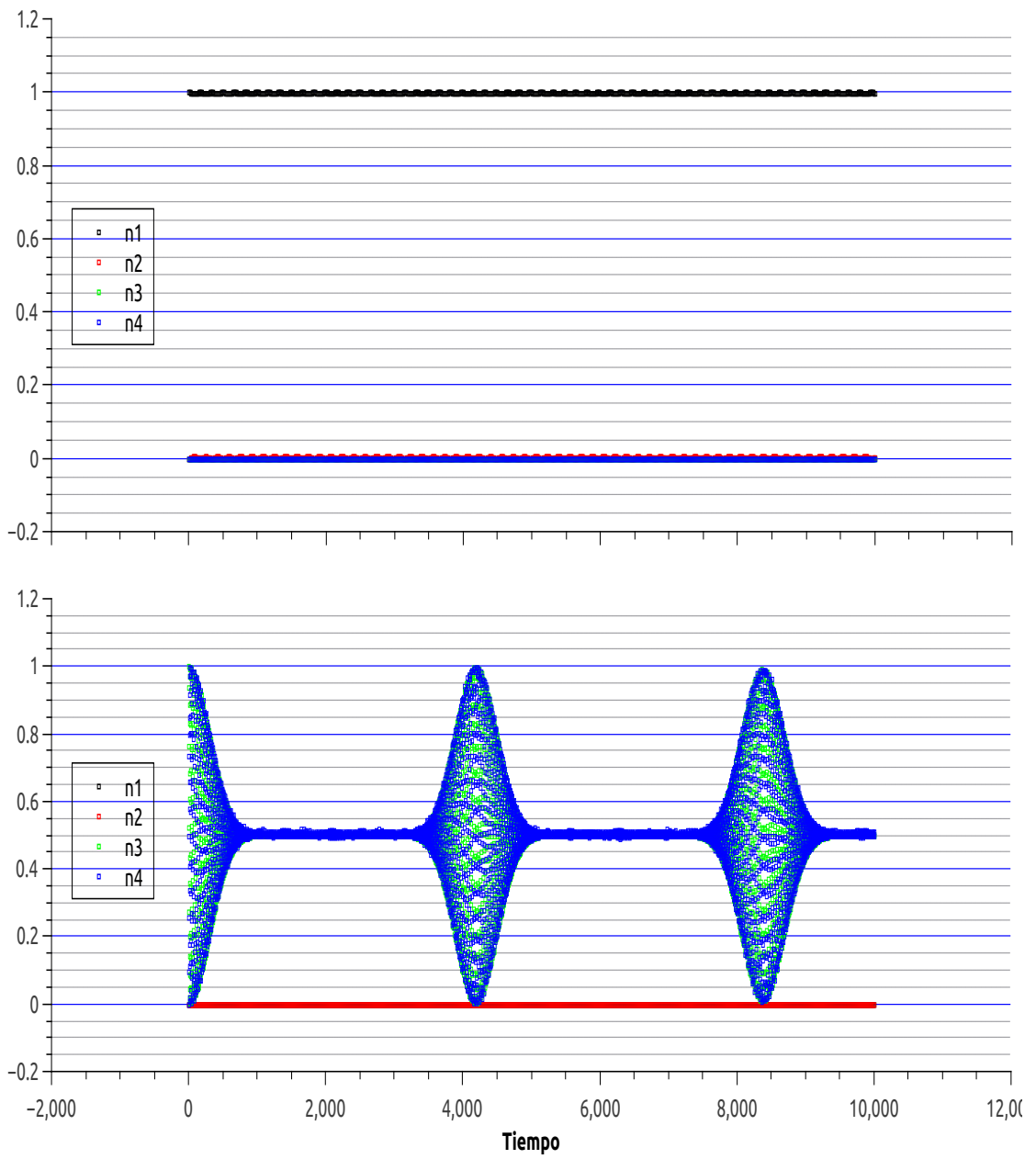


Figura 4.15: $N=20$, $U_0 = 0,001$

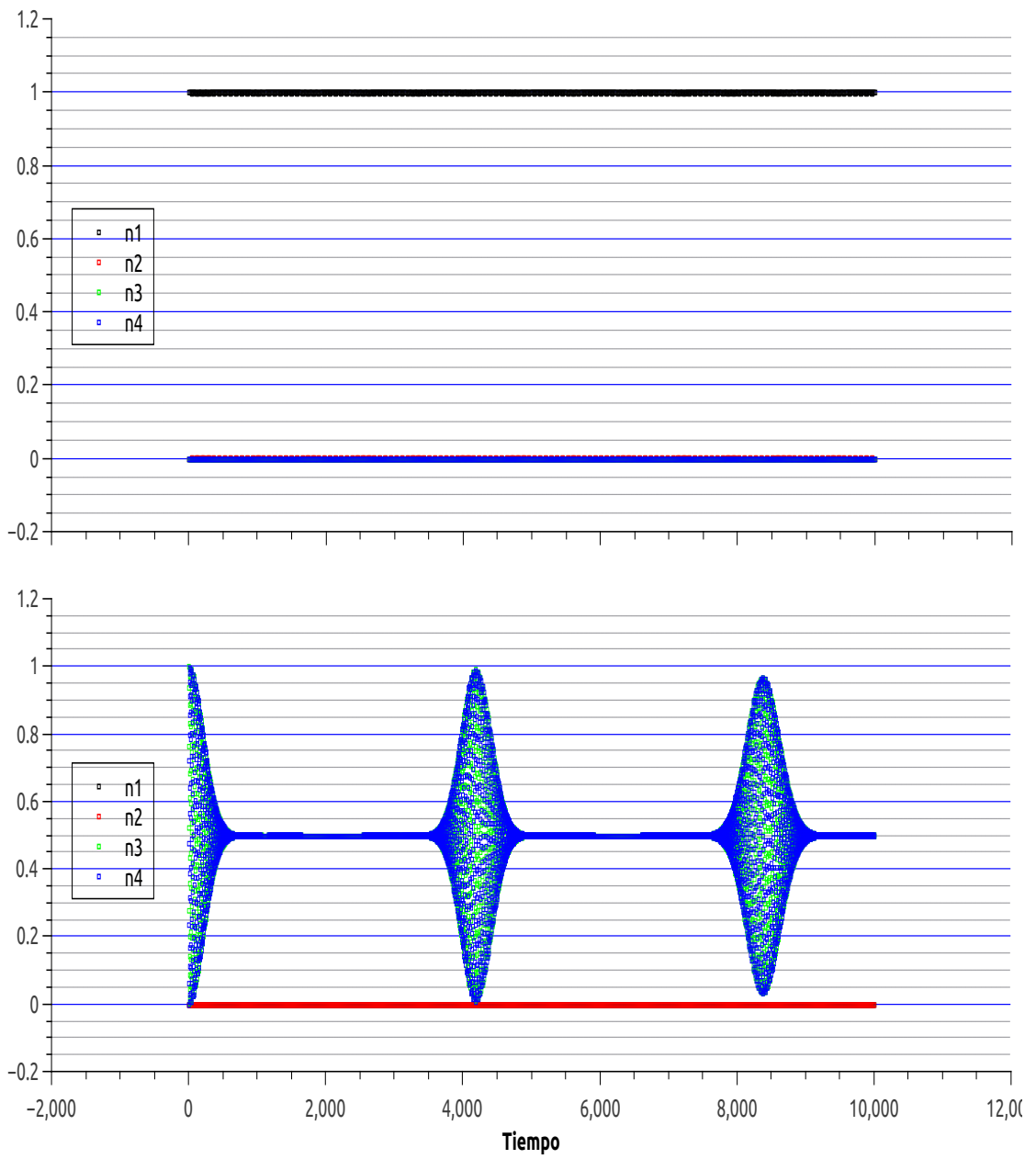


Figura 4.16: $N=40$, $U_0 = 0,001$

4.5.2. Variación de U_0

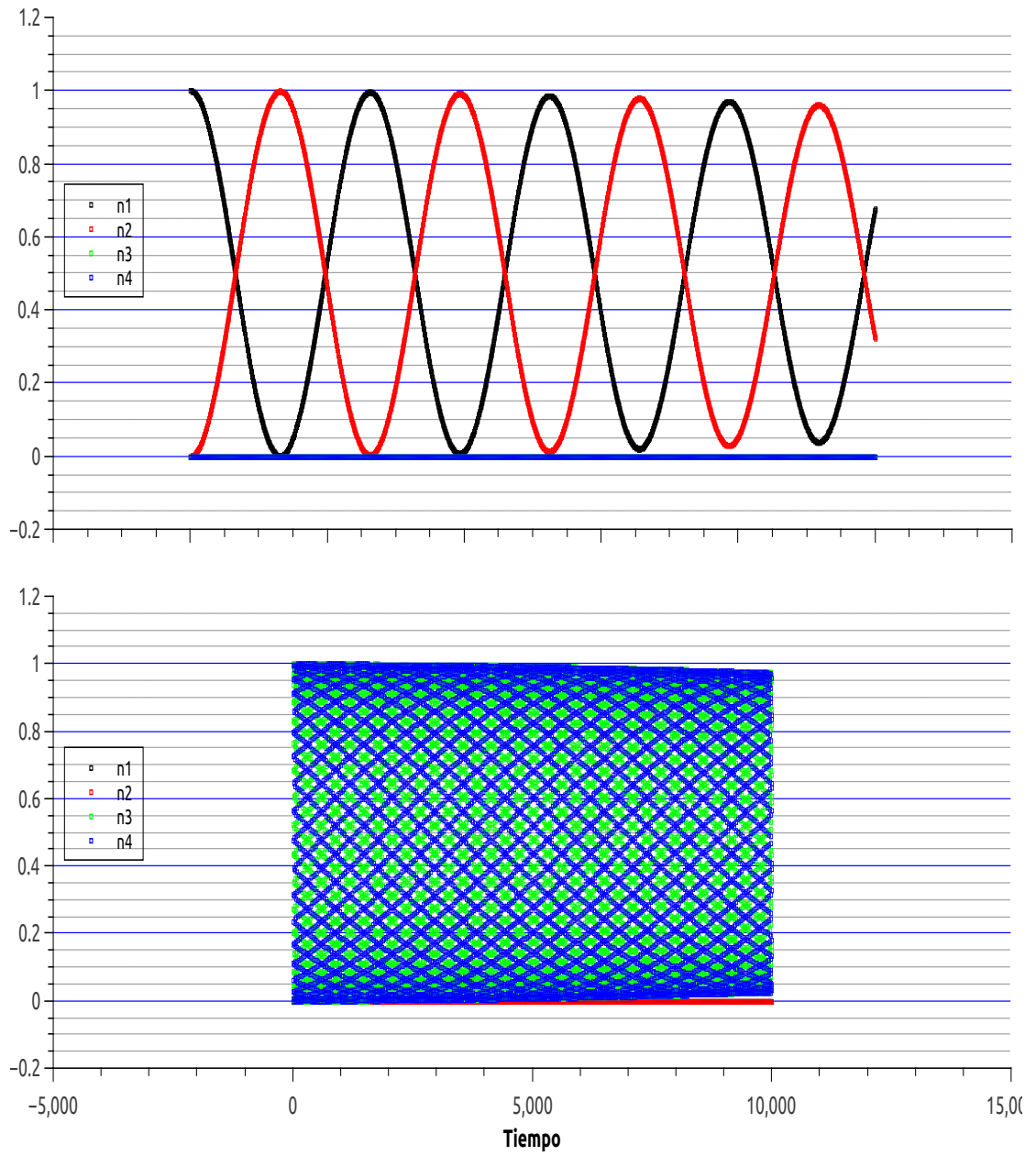


Figura 4.17: $N=20$, $U_0 = 0,00001$

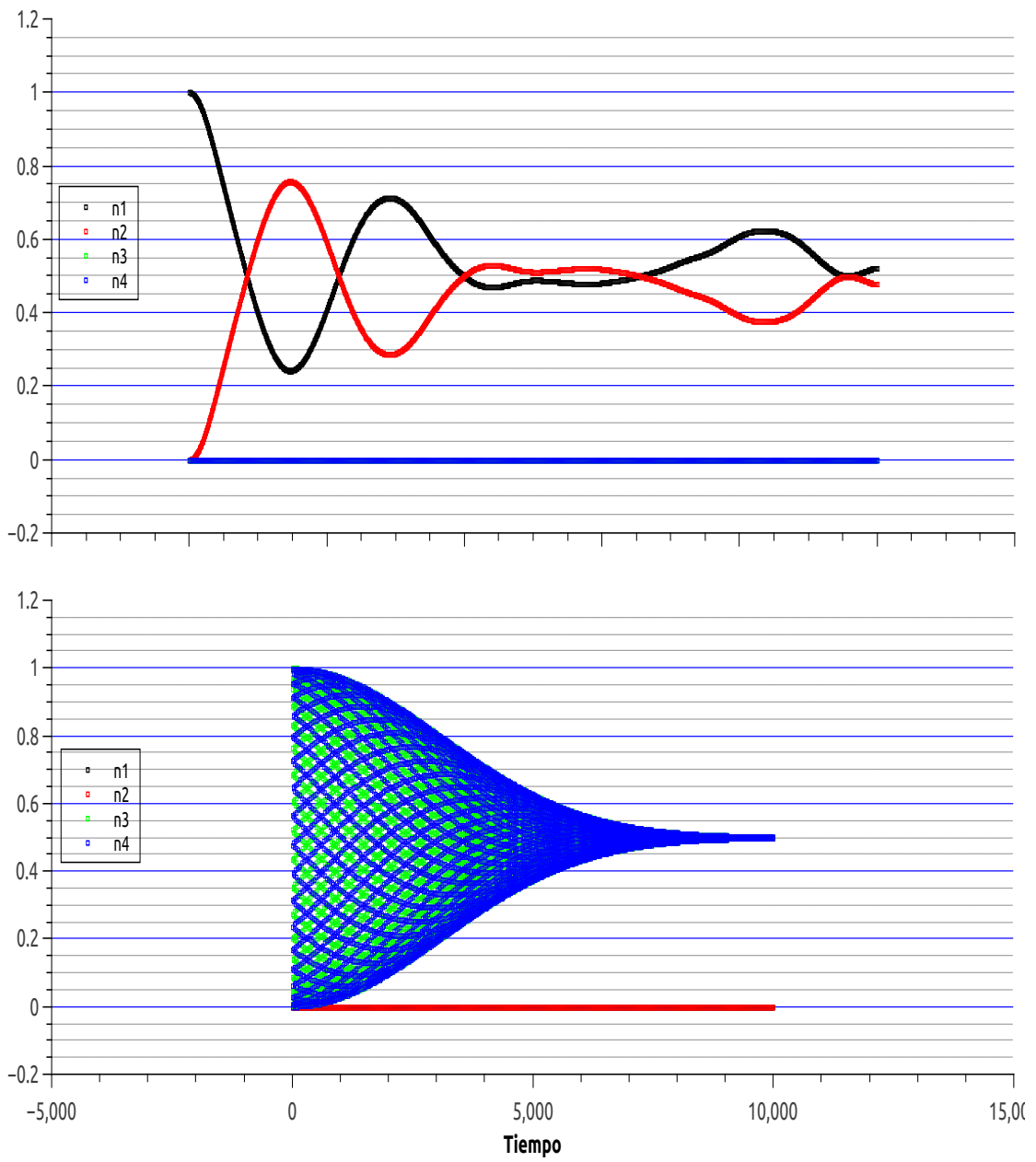


Figura 4.18: $N=20$, $U_0 = 0,0001$

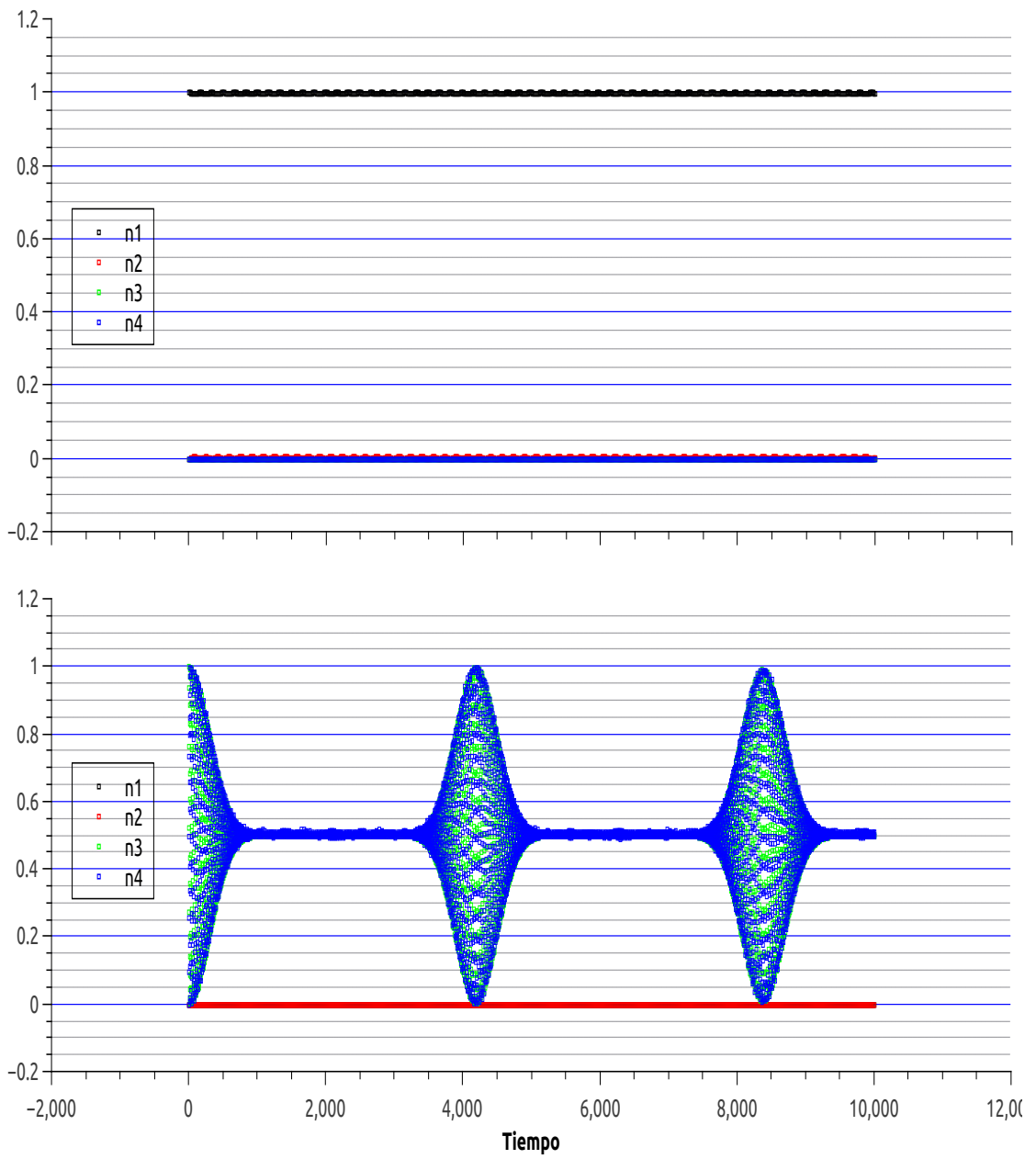


Figura 4.19: $N=20$, $U_0 = 0,001$

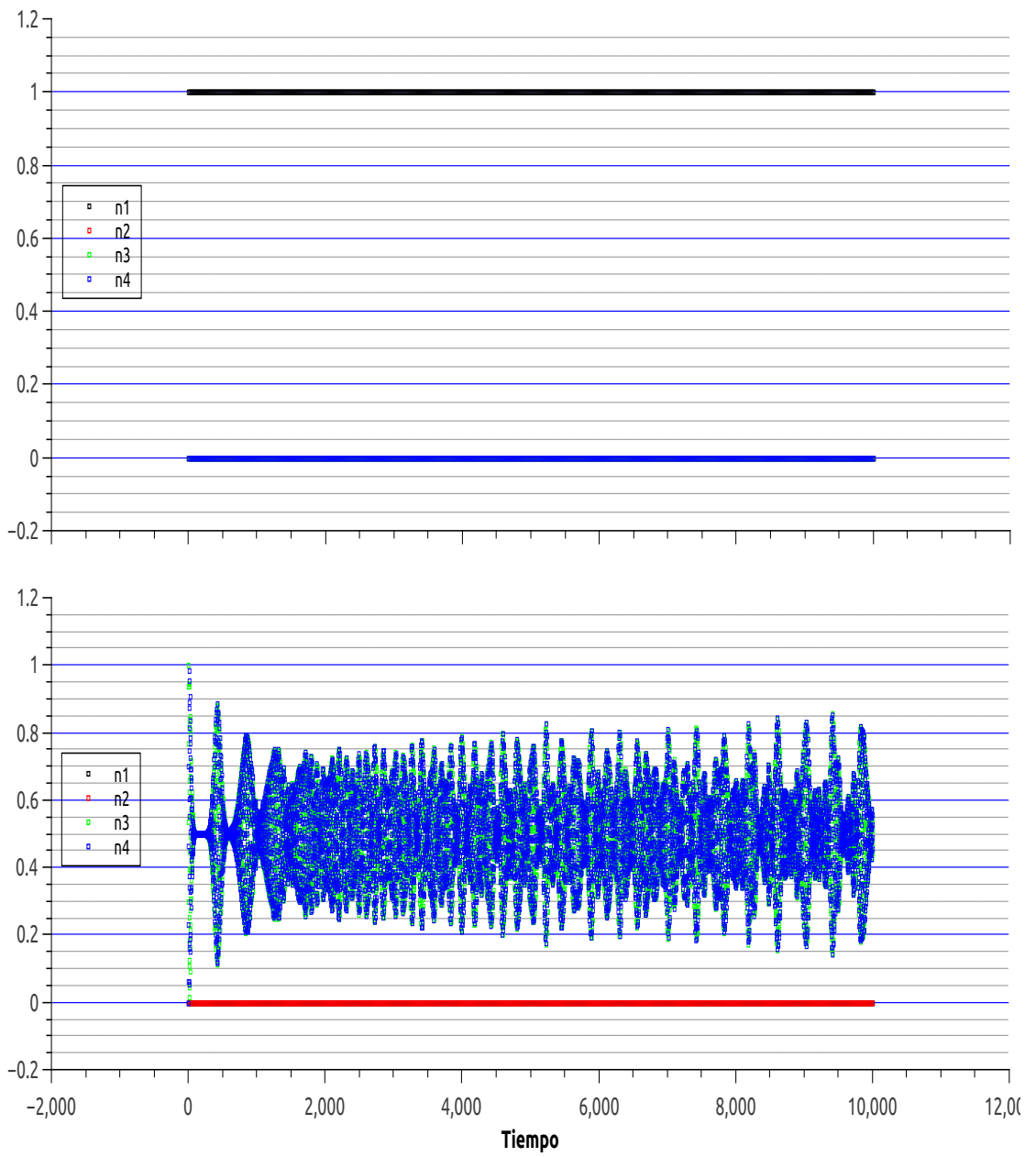


Figura 4.20: $N=20$, $U_0 = 0,01$

4.5.3. Análisis

Las gráficas parecen mostrar que cada uno de los parámetros analizados controla un aspecto diferente del problema. La variación de la población total de partículas muestra como los tiempos de relajación y de recurrencia dependen fuertemente de U . Sin embargo, no se nota un aumento marcado en el transporte de partículas en el estado base. Sin embargo, es de mucho interés notar que este transporte aumenta claramente en el caso donde la energía de interacción disminuye. Si se observa, en la sección 2.5 se establecieron los valores:

$$J^0 = 0,0012$$

$$J^1 = 0,2548$$

$$\hbar\omega = 11,128$$

El transporte de partículas entre los estados n_1 y n_2 se aproxima a cero conforme $U \rightarrow J^0$ y el transporte de partículas entre los estados n_3 y n_4 se aproxima a cero conforme $U \rightarrow J^1$. Si la energía de interacción supera a la energía de tunelaje, la aproximación de dos bandas deja de ser utilizable, pues las partículas solo serán capaces de moverse en bandas tales que $U_0 \ll J^i$.

Capítulo 5

Tiempos de Recurrencia y Relajación

La última perspectiva que se analiza del sistema es la descripción del efecto del valor de la interacción y de la cantidad de partículas sobre los tiempos de recurrencia y relajación. Se define el tiempo de recurrencia como el tiempo que le toma al sistema regresar a su condición inicial y el tiempo de relajación como el tiempo que toma para que el sistema llegue a un estado de equilibrio desde su condición inicial. Se analiza únicamente el caso de la condición inicial $|0, 0, N, 0 \rangle$. Se varía tanto la interacción, utilizando los valores: $U_0 = 0,01, 0,001, 0,0001$ y $0,00001$ como el número de partículas, se utiliza $N = 5, 10, 20, 30$ y 40 . Para la variación en el valor de la interacción la población de partículas se mantiene constante en $N = 20$. Para la variación en el número de partículas se utiliza $U_0 = 0,001$. En el caso de las variaciones de interacción se presentan los datos en gráficas log-log. Se presentan ajustes para todos los datos.

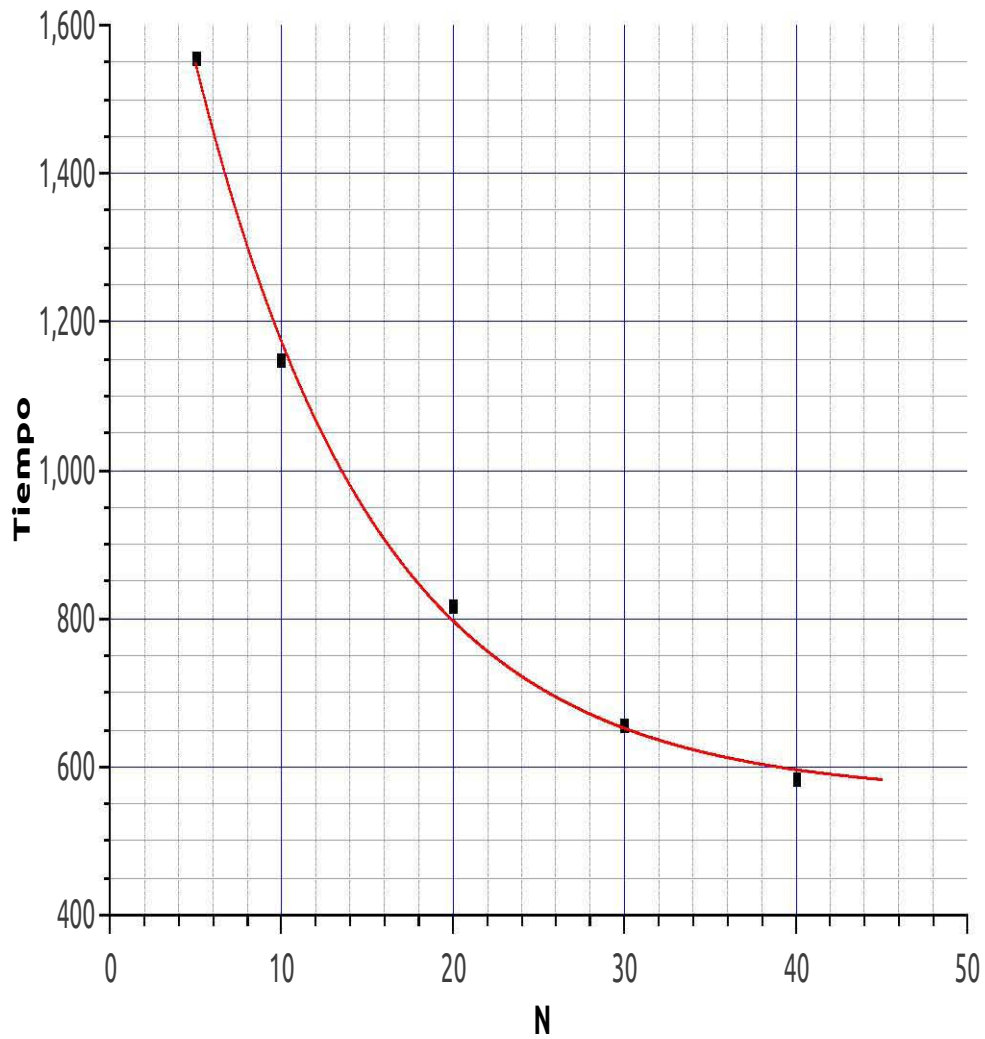


Figura 5.1: Tiempo de relajación del sistema en función del número de partículas. El ajuste corresponde a una función del tipo $Ae^{-\frac{N}{\tau}} + t_0$. El ajuste da los valores: $A = 1,591,0577$, $\tau = 10,4735$ y $t_0 = 560,6379$. El ajuste tiene $R^2 = ,9981$

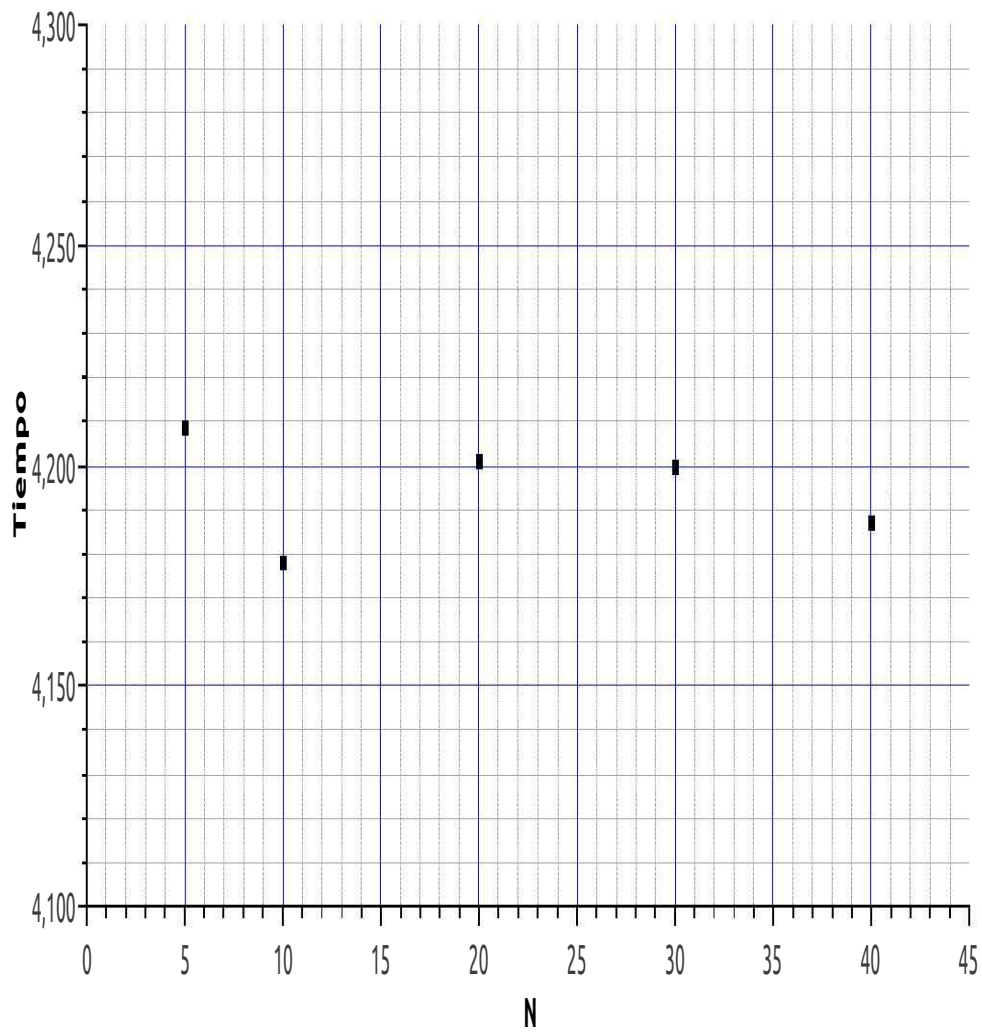


Figura 5.2: Tiempo de recurrencia del sistema en función del número de partículas. Debido a que el punto exacto de recurrencia es difícil de localizar sin un tamaño de paso de tiempo mucho más pequeño del utilizado, los datos presentan cierta variabilidad. No se presenta un ajuste pues se considera que los datos no muestran variación respecto a N .

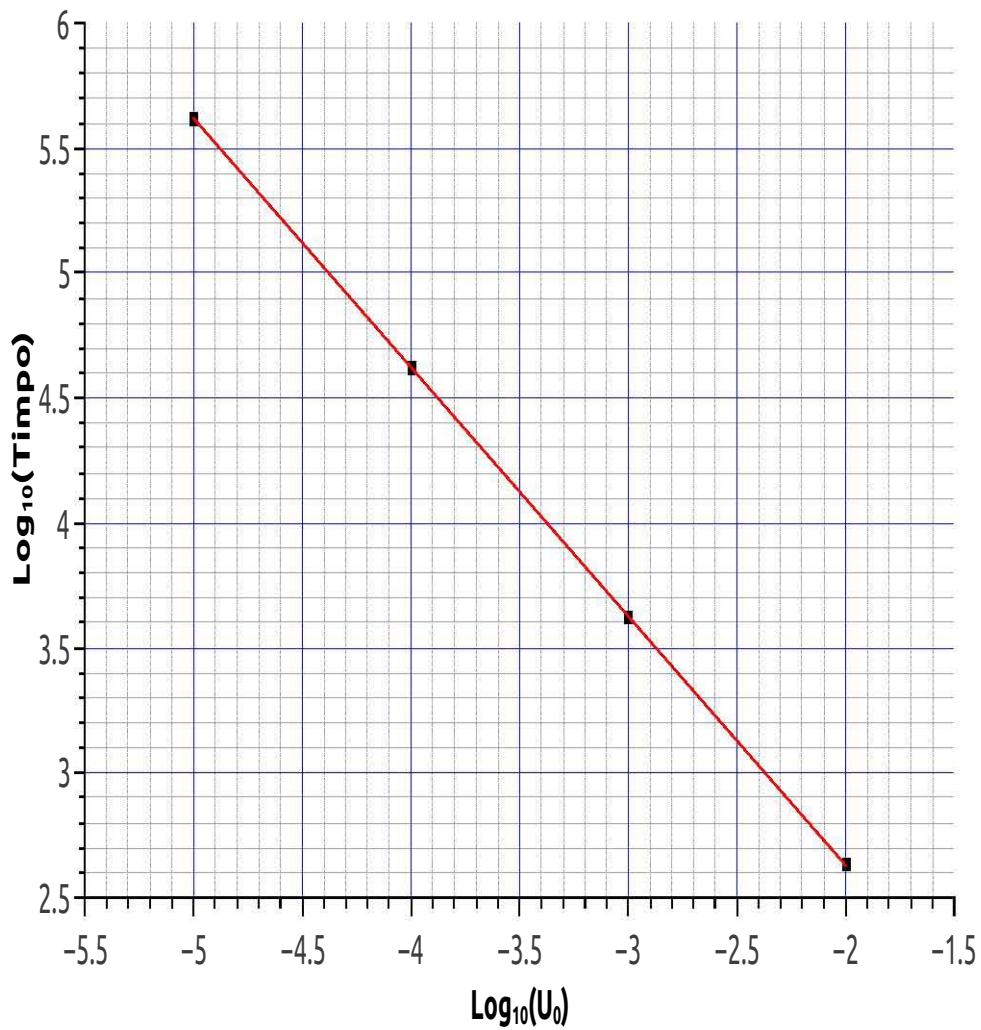


Figura 5.3: Tiempo de recurrencia del sistema en función del valor de la interacción. Se presentan los logaritmos en base 10 de tanto el tiempo como de la interacción. Se realizó un ajuste líneal de la forma $Ax+t_0$ con $A = -1,0866$, y $t_0 = -0,3148$. El ajuste tiene $R^2 = ,9999$

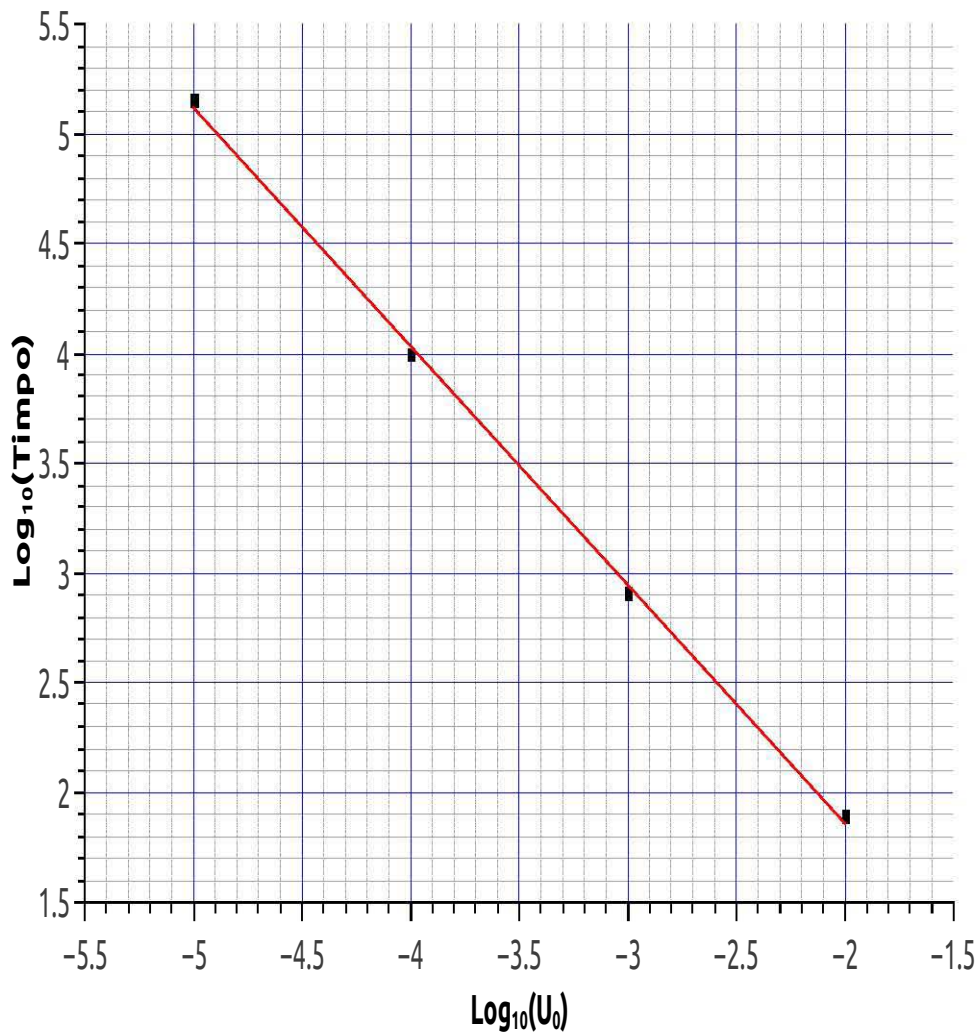


Figura 5.4: Tiempo de relajación del sistema en función del valor de la interacción. Se presentan los logaritmos en base 10 de tanto el tiempo como de la interacción. Se realizó un ajuste lineal de la forma $Ax + t_0$ con $A = -0,9964$, y $t_0 = 0,6375$. El ajuste tiene $R^2 = ,9999$

Puede observarse de los datos que el tiempo de relajación del sistema parece comportarse de forma exponencial con el número de partículas. Esto lleva a pensar que existe un tiempo mínimo de relajación del sistema, que en el ajuste es representado por t_0 . Es muy importante notar que el tiempo de recurrencia parece ser independiente del número de partículas, lo cual permite variar el tiempo de recurrencia y el tiempo de relajación de manera independiente. Ambos tiempos parecen tener la misma dependencia respecto a la interacción y parecen variar de forma inversa a la interacción.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se estudió el sistema de un condensado de Bose-Einstein con interacción, confinado por un potencial óptico en una dimensión en la aproximación de dos bandas. En particular se analizaron los estados estacionarios y la dinámica del gas de Bose confinado en el citado potencial. En el capítulo 1 se abordó la motivación experimental que sustenta el estudio del sistema y se detallaron los parámetros experimentales involucrados en el mismo. En el capítulo 2 se hizo la deducción del Hamiltoniano utilizado y se justificaron los parámetros del estudio, esto es, se determinaron los valores de los parámetros J^i (coeficientes de tunelaje entre las bandas) y U (amplitud de la interacción entre pares de partículas) para el cual el Hamiltoniano es válido. En el capítulo 3 se estudiaron los estados estacionarios del sistema y el comportamiento de los eigenvalores del Hamiltoniano como función de los parámetros del problema. Se trató el comportamiento dinámico del sistema en el capítulo 4, al analizar la evolución temporal de varios estados así como su dependencia sobre los parámetros del sistema. Finalmente se estudiaron los tiempos de relajación y recurrencia del sistema en el capítulo 5. De estos estudios se concluye que:

1. El problema del doble pozo no puede limitarse al análisis de solo una banda, pues el agregar bandas adicionales afecta fuertemente el comportamiento tanto estacionario como dinámico del sistema. Para determinar qué parámetros deben utilizarse en el Hamiltoniano es necesario obtenerlos desde primeros principios a base de resolver el problema de las funciones de onda de una partícula en el potencial de dos pozos. Dicho análisis permite extraer los valores de J^i , en otras palabras, la forma particular del potencial determina las energías de tunelaje. Dados los valores de dichas energías, se trabajó en el sistema de muchos cuerpos, i.e. el gas de Bose, para a su vez determinar el intervalo de

valores posibles para la interacción U entre las partículas.

2. El valor de expectación para el operador \hat{N}_L en los estados estacionarios del sistema, es decir en los eigenestados del sistema de muchos cuerpos, presenta la misma estructura si se varia el número de partículas. Para mostrar este hecho se hizo el análisis para $N = 20$ y $N = 40$. Es importante comentar que cálculos para valores mayores de N son irrealizables dadas las limitaciones computacionales. El comportamiento de los valores de expectación \hat{N}_L es el mismo para distintos valores del parámetro U . El incremento en el parámetro de interacción da lugar a que los eigenvalores aumenten en magnitud línealmente y lleva a que existan más eigenestados que corresponden a ocupación total o nula de cualquiera de los dos pozos en lugar de estados que corresponden a una distribución simétrica de partículas en ambos pozos. Esto queda evidenciado por las figuras 3 y 3. A dicho fenómeno se le conoce como autoatrapamiento.
3. A partir del estudio de la evolución dinámica para diferentes condiciones iniciales se determinaron los posibles comportamientos del gas de Bose al incluir la segunda banda. Como puede verse en 2.1, la diferencia de energía entre las dos bandas es mucho mayor que la diferencia de energía entre los niveles individuales que las componen, es decir $\hbar\omega \gg J^i$ lo cual lleva a que el tunelaje entre pozos sea la forma dominante de oscilación, en lugar de saltos de banda dentro de un mismo pozo. El tunelaje es dominante en la segunda banda de energía debido a que $J^1 > U$ para un mayor rango de valores de interacción. Es necesario asegurar que $J^i \gg U$ para poder justificar no agregar más bandas de energía a la aproximación. De no ser así no es posible encontrar tiempos de recurrencia o de relajación bien definidos, y las oscilaciones del valor de expectación de \hat{N}_L dejan de ser regulares.
4. El tiempo de relajación del sistema parece depender exponencialmente de N , pero el tiempo de recurrencia parece ser independiente de la población total de partículas. Ambos tiempos parecen depender de $\frac{1}{U}$, de manera que ajustar ambos parámetros podría en teoría modular ambos tiempos a los valores deseados. Para valores muy pequeños de U es necesario modelar el sistema para tiempos mucho mayores para poder observar las oscilaciones en el valor de expectación de \hat{N}_L .

Bibliografía

- [1] Frederick Reif *Statistical Physics* McGraw-Hill 1967
- [2] C.J. Pethick, Henrik Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* Cambridge University Press 2002
- [3] R Gati and M K Oberthaler *A bosonic Josephson junction* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.40 (2007) R61–R89 2007
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor* Science, 269:198–201 1995
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet. *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions* Review Letters, 75(9):1687–1690 1995
- [6] Octavio Miramontes, Karen Volke *Fronteras de la Física en el siglo XXI* CopIt-arXives 2013
- [7] Anthony J. Leggett *Quantum Liquids: Bose Condensation And Cooper Pairing in Condensed-matter Systems* Oxford University Press 2006
- [8] Christopher J. Foot *Atomic Physics* Oxford University Press 2005
- [9] A. M. Rey. *Ultracold bosonic atoms in optical lattices* PhD thesis, University of Maryland 2004
- [10] A. J. Daley *Manipulation and Simulation of Cold Atoms in Optical Lattices* PhD thesis, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck 2005
- [11] G. K. Brennen, C. M. Caves, P. S. Jessen, and I. H. Deutsch *Quantum logic gates in optical lattices* Physical Review Letters, 82:1060 1999
- [12] A. Peters, K. Y. Chung, and S. Chuo *Measurement of gravitational acceleration by dropping atoms* Nature, 400:849 1999

- [13] B. T. Seaman, M. Krömer, D. Z. Anderson, and M. J. Holland *Atomtronic: a ultracold atom analogs of electronic devices* e-print cond-mat 0606625 2006
- [14] Victor Romero-Rochín *Notes on second quantization and Bose gases at low temperatures* Instituto de Física UNAM 2009
- [15] Vadim Kaplunovsky *Quantum Field Theory class notes* University of Texas in Austin
- [16] D. R. Dounas-Frazer, A. M. Hermundstad, and L. D. Carr *Ultracold Bosons in a Tilted Multilevel Double-Well Potential* Department of Physics, Colorado School of Mines, Golden, Colorado 80401, USA November 14, 2007
- [17] Pablo Yanes, *Método de segunda cuantización y gases de bosones interactuantes en una red óptica: solución computacional* UNAM 2012
- [18] Paolo Giannozzi *Numerical Methods in Quantum Mechanics (Lecture Notes)* University of Udine 2013
- [19] Rosario Paredes *Tunneling of ultracold Bose Gases in multiple wells* Physical Review A 73 2006
- [20] L.D. Landau, E.M. Lifshitz *Quantum Mechanics, 3rd Edition* Butterworth-Heinemann 1977

Apéndice A

Tiempos de Cómputo

Para justificar el trabajar con $N = 20$ en la mayoría de los casos, se presentan los tiempos de cálculo para las dos tareas principales realizadas, la solución del eigensistema asociado al Hamiltoniano y la evolución temporal de sus eigenfunciones. Todos los cálculos se realizaron en Ubuntu 12.04 con un procesador Intel® Core™ i7-2600 CPU @ 3.40GHz \times 8 utilizando el compilador g++ versión 4.6. El tiempo de cálculo requerido para resolver el eigensistema asociado se muestra en segundos en la figura A.1 y el tiempo requerido para realizar 100 pasos de la evolución temporal se muestra en la figura A.2. Los eigensistemas se resolvieron utilizando la GNU Scientific Library.

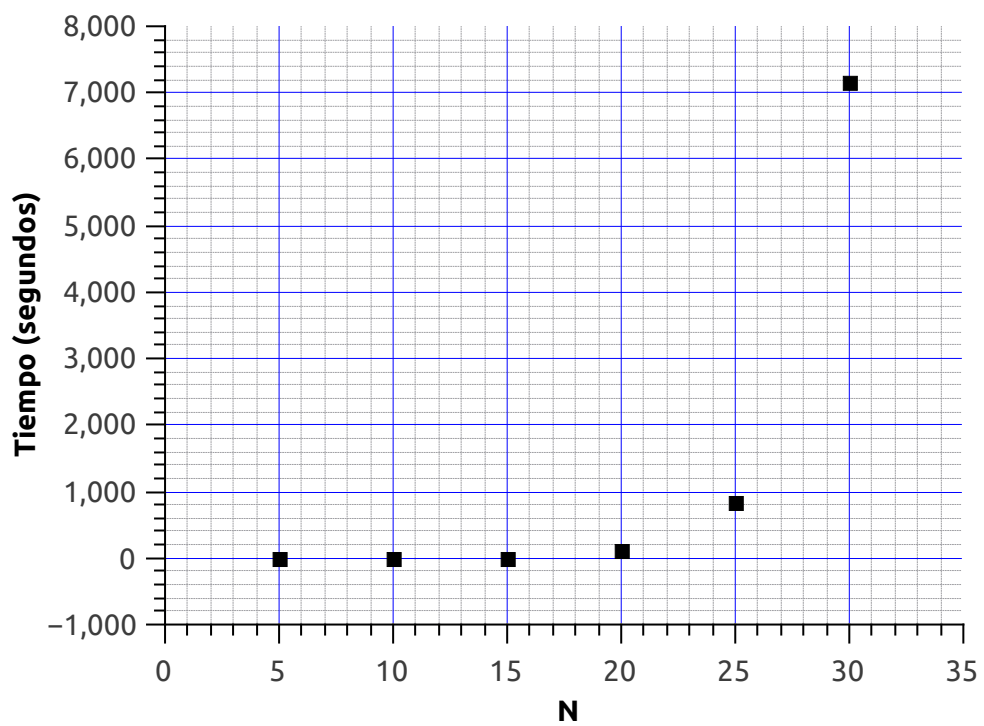


Figura A.1: Tiempo de cómputo en segundos contra número de partículas que ocupa la solución de un eigensistema

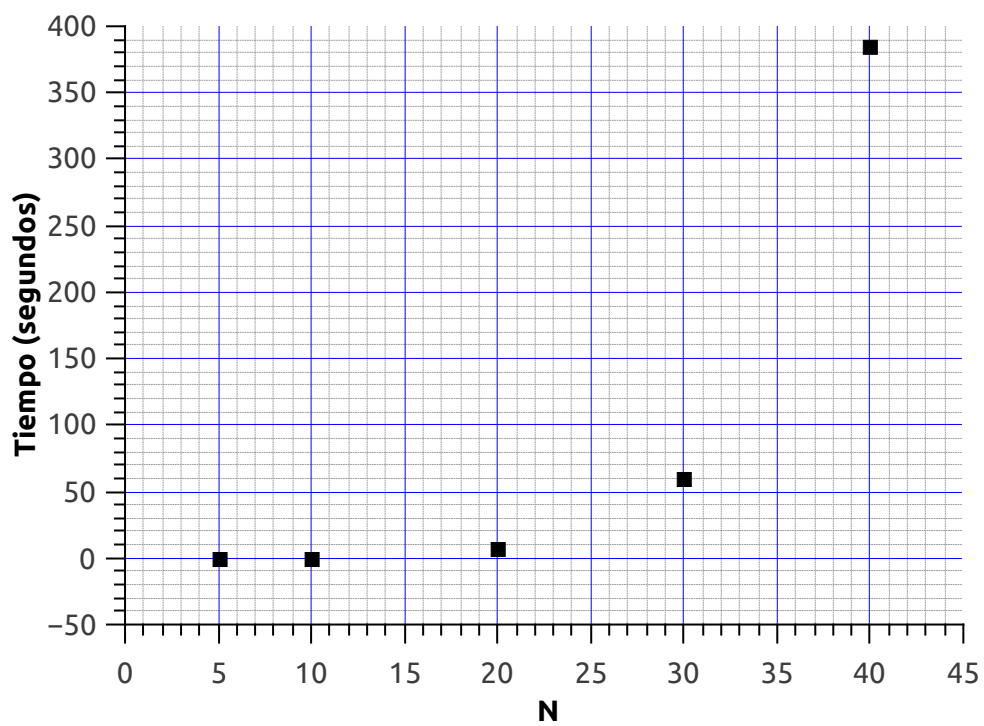


Figura A.2: Tiempo de cómputo en segundos contra número de partículas que ocupa realizar 100 iteraciones de evolución temporal

Apéndice B

Código Generador: Base de Fock

El programa primero debe generar la lista de kets y luego generar la matriz correspondiente en base a sus interacciones. Para aplicar el algoritmo anterior, utilizo 3 *for loops* anidados, con 3 índices separados. El primer loop corre desde 0 hasta N , el segundo desde el índice del primero hasta N y el último desde el índice del segundo hasta N . Los valores de los índices corresponden a las posiciones de las divisiones de la sección anterior, y los valores de ocupación se guardan en 4 arreglos distintos, cada uno corresponde a una n . El código se ve así:

```
for(k1=0;k1<=N;++k1)
{
    for(k2=k1;k2<=N;++k2)
    {
        for(k3=k2;k3<=N;++k3)
        {
            n1[i]=k1;
            n2[i]=k2-k1;
            n3[i]=k3-k2;
            n4[i]=N-k3;

            ++i;
        }
    }
}
```

Los arreglos n son de tamaño $NT = \frac{(N+3)(N+2)(N+1)}{6}$. De esta forma puedo hacer referencia a los números de cada ket de forma independiente, pero el índice del arreglo asegura que no haga referencia a números que corresponden a distintos kets de forma accidental. Para generar la matriz, utilizo la estructura matricial de la GNU Scientific Library, para facilitar el almacenamiento de la misma en un archivo. Aplico cada término del Hamiltoniano de forma independiente, utilizando la misma estructura condicional. Utilizo 2 for loops anidados para recorrer toda la matriz. Para cada par de índices, reviso si los kets producen algún valor, haciendo referencia a los arreglos de kets con los mismos índices con los cuales recorro la matriz.

Apéndice C

Código Generador: Hamiltoniano

Para H^1 el código se ve de la siguiente forma:

```
for(i=0;i<NT;++i)
{
    for(j=0;j<NT;++j)
    {
        if((n1[i]==n1[j]+1) && (n2[i]==n2[j]-1) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,-J0*sqrt((n1[j]+1)*n2[j]));
        }

        if((n1[i]==n1[j]-1) && (n2[i]==n2[j]+1) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,-J0*sqrt(n1[j]*(1+n2[j])));
        }

        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,U0*(n1[j]*(n1[j]-1)+n2[j]*(n2[j]-1))+E0*(n1[j]+n2[j]));
        }
    }
}
```

Lo que hace el código es revisar si el arreglo con índice j es igual al arreglo con índice i si tomo en cuenta la acción del Hamiltoniano. Esto se repite para H^1 y H^{01} y finalmente la matriz se guarda en un archivo cuyo nombre contiene el valor de N y U ,

Apéndice D

Código Generador: Eigenvalores y Eigenvectores

```
#include <iostream>
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <sstream>
#include <time.h>
#include <gsl/gsl_matrix.h>
#include <gsl/gsl_eigen.h>
#include <gsl/gsl_sort.h>
#include <gsl/gsl_sort_vector.h>

using namespace std;
```

El código incluye paquetes para medir el tiempo de ejecución de los comandos (time.h), así como para generar los archivos donde se guardan los resultados de los cálculos (sstream, fstream). También incluye un paquete para poder ordenar los eigenvectores de acuerdo al valor del eigenvalor correspondiente.

```
int N=10,i=0,j,NT,1;
double U0=10,J0=0.0012,E0=0,J1=0.25458,E1=11.128,U1,U01,runtime;

int main()
{

clock_t start, end;
```

```

start=clock();

NT=(N+1)*(N+2)*(N+3)/6;

int n1[NT],n2[NT],n3[NT],n4[NT],k1,k2,k3;

gsl_matrix *H = gsl_matrix_calloc(NT,NT);
gsl_matrix *evec = gsl_matrix_calloc(NT,NT);
gsl_vector *eval = gsl_vector_alloc(NT);
gsl_eigen_symmv_workspace *w = gsl_eigen_symmv_alloc(NT);

```

Es necesario declarar una matriz “evec” y un vector “eval” para almacenar los resultados finales, así como un “workspace” para que la rutina tenga espacio para trabajar. Las rutinas que utilizo en este programa asumen que H es simétrica y real. Primero genero el espacio de Foch con el código antes visto y luego genero H utilizando esta base.

```

for(k1=0;k1<=N;++k1)
{
    for(k2=k1;k2<=N;++k2)
    {
        for(k3=k2;k3<=N;++k3)
        {
            n1[i]=k1;
            n2[i]=k2-k1;
            n3[i]=k3-k2;
            n4[i]=N-k3;

            ++i;
        }
    }
}

```

```

U1=.75*U0;
U01 = .5*U0;

```

/*Ahora los indices de los kets se encuentran guardados, el i-esimo ket está guardado

```

end=clock();
runtime=((double) (end - start)) / CLOCKS_PER_SEC;

cout << "variables declaradas en " << runtime << "s" << endl;

start=clock();

/*Lo que hace el programa es comparar los valores n en el i-esimo y j-esimo lugar, par

/*Primero llenamos H0*/

for(i=0;i<NT;++i)
{
    for(j=0;j<NT;++j)
    {
        if((n1[i]==n1[j]+1) && (n2[i]==n2[j]-1) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,-J0*sqrt((n1[j]+1)*n2[j]));
        }

        if((n1[i]==n1[j]-1) && (n2[i]==n2[j]+1) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,-J0*sqrt(n1[j]*(1+n2[j])));
        }

        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,U0*(n1[j]*(n1[j]-1)+n2[j]*(n2[j]-1))+E0*(n1[j]+n2
        }
    }
}

/*Luego llenamos H1*/

for(i=0;i<NT;++i)
{
    for(j=0;j<NT;++j)
    {
        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]+1) && (n4[i]==n4[j]
        {
            gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)-J1*sqrt((n3[j]+1)*n4[j]));
        }
    }
}

```



```

    }

    if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]-1) && (n4[i]==n4[j]))
    {
    gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)-J1*sqrt(n3[j]*(1+n4[j])));
    }

    if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
    {
    gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U1*(n3[j]*(n3[j]-1)+n4[j]*(n4[j]-1)));
    }
}

}

/*Finalmente, llenamos H01*/

for(i=0;i<NT;++i)
{
    for(j=0;j<NT;++j)
    {
        if((n1[i]==n1[j]+2) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]-2) && (n4[i]==n4[j]))
        {
        gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U01*sqrt(n3[j]*(n3[j]-1)*(n4[j]*(n4[j]-1))));
        }

        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]+2) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
        {
        gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U01*sqrt(n4[j]*(n4[j]-1)*(n3[j]*(n3[j]-1))));
        }

        if((n1[i]==n1[j]-2) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]+2) && (n4[i]==n4[j]))
        {
        gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U01*sqrt(n1[j]*(n1[j]-1)*(n3[j]*(n3[j]-1))));
        }

        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]-2) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))
        {
        gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U01*sqrt(n2[j]*(n2[j]-1)*(n3[j]*(n3[j]-1))));
        }

        if((n1[i]==n1[j]) && (n2[i]==n2[j]) && (n3[i]==n3[j]) && (n4[i]==n4[j]))

```

```

        {
        gsl_matrix_set(H,i,j,gsl_matrix_get(H,i,j)+U01*4*(n1[j]*n3[j]+n2[j]*n4
        }
    }

}

end=clock();
runtime=((double) (end - start)) / CLOCKS_PER_SEC;

cout << "H generada en " << runtime << "s" << endl;

start=clock();

```

Las rutinas que vienen a continuación dan un resultado final la matriz *eval* que contiene a los eigenvectores del sistema como sus columnas y el vector *eval*, que contiene a todos los eigenvalores del sistema, ordenados de menor a mayor. El orden de los eigenvectores corresponde con el de los eigenvalores.

```

/*Genero los eigenvalores y eigenvectores, y los ordeno */
gsl_eigen_symmv(H, eval,eval, w);

end=clock();
runtime=((double) (end - start)) / CLOCKS_PER_SEC;

cout << "Eigensistema resuelto en " << runtime << "s" << endl;

start=clock();

gsl_eigen_symmv_sort (eval, eval,GSL_EIGEN_SORT_ABS_ASC);

end=clock();
runtime=((double) (end - start)) / CLOCKS_PER_SEC;

cout << "Eigensistema ordenado en " << runtime << "s" << endl;

```

Finalmente los datos se almacenan en archivos separados. Utilizo strings para poder codificar los parámetros U y N en el nombre del archivo. De esta forma solo es necesario diagonalizar H una vez por cada combinación

de parámetros, lo cual es muy importante dado el tiempo de ejecución de la diagonalización.

```
ostreamstream ss,ss1;

ss<<"Evecs_N_"<<N<<"_U0_"<<U0<<".txt";
ss1<<"Eval_N_"<<N<<"_U0_"<<U0<<".txt";

string str(ss.str());
const char* fname = str.c_str();
FILE * f = fopen(fname, "wb");

string str1(ss1.str());
const char* fname1 = str1.c_str();
FILE * f1 = fopen(fname1, "wb");

gsl_matrix_fwrite(f, evec);
gsl_vector_fwrite (f1, eval);

fclose(f);
fclose(f1);

}
```

Apéndice E

Código Generador: Valores de Expectación para el Operador Número

Utilizando los datos obtenidos con el código de la sección anterior, calculo el valor de expectación del operador número para el pozo 1 para cada eigenvalor para $N = 40$. El código para obtener estos valores es:

```
#include <iostream>
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <sstream>
#include <time.h>
#include <gsl/gsl_matrix.h>
#include <gsl/gsl_eigen.h>
#include <gsl/gsl_sort.h>
#include <gsl/gsl_sort_vector.h>

using namespace std;

int main()
{

int N=40, NT, i, j,k1,k2,k3;
double U0=.001, Num, n;

NT=(N+1)*(N+2)*(N+3)/6;
n=1.0/N;

/*Primero declaro todos los vectores y matrices que necesito*/
```

```

gsl_vector *num = gsl_vector_calloc(NT);
gsl_matrix *evec = gsl_matrix_calloc(NT,NT);
gsl_vector *eval = gsl_vector_alloc(NT);

/*genero el operador número*/

i=0;

for(k1=0;k1<=N;++k1)
{
    for(k2=k1;k2<=N;++k2)
    {
        for(k3=k2;k3<=N;++k3)
        {
            gsl_vector_set(num,i,k1+k3-k2);
            ++i;
        }
    }
}

gsl_vector_scale(num,n);

cout << "Operador número generado"<< endl;

/* Leo los eigenvalores y eigenvectores, que se encuentran ordenados, al vector eval y

ostringstream ss,ss1, ss2;

ss<<"Evecs_N_"<<N<<"_U0_"<<U0<<".txt";
ss1<<"Eval_N_"<<N<<"_U0_"<<U0<<".txt";

string str(ss.str());
const char* fname = str.c_str();
FILE * f = fopen(fname, "r");

string str1(ss1.str());
const char* fname1 = str1.c_str();
FILE * f1 = fopen(fname1, "r");

gsl_matrix_fread(f,evec);
gsl_vector_fread(f1,eval);

```

```

fclose(f);
fclose(f1);

cout << "Eigenvalores y eigenvectores leidos" << endl;

/*Ahora, genero el valor de expectación para cada eigenvalor, que se almacena en un ar

ss2<<"ExpectacionPozo1_N"<<N<<"_U0_"<<U0<<".txt";

string fname2;

fname2=ss2.str();
ofstream fout;
fout.open(fname2.c_str());

Num=0;

for(j=0;j<NT;++j)
{
    for(i=0;i<NT;++i)
    {
        Num=Num+gsl_vector_get(num,i)*gsl_matrix_get(evec,i,j)*gsl_matrix_get(

    fout << gsl_vector_get(eval,j) <<"          "<<Num<<endl;
    Num=0;
}

cout << "Trabajo terminado" << endl;

fout.close();

}

```

Apéndice F

Código: Evolución Temporal

```
/*
Este programa toma los eigenvalores y eigenvectores de el doble pozo y una condición i

*/

#include <iostream>
#include <cmath>
#include <fstream>
#include <sstream>
#include <time.h>
#include <gsl/gsl_complex.h>
#include <gsl/gsl_complex_math.h>
#include <gsl/gsl_matrix.h>
#include <gsl/gsl_vector.h>
#include <gsl/gsl_blas.h>

using namespace std;

int main()
{

double dt, U0=.001,num1=0,n, runtime,t,prog;
int T=10000, i, j, N=20, NT,k,k1,k2,k3,ci=165;

dt = 1;
NT = (N+1)*(N+2)*(N+3)/6;
```

```

n= 1.0/N;

gsl_matrix *evec = gsl_matrix_calloc(NT,NT);
gsl_vector *eval = gsl_vector_calloc(NT);

gsl_vector_complex *num = gsl_vector_complex_calloc(NT);
gsl_vector_complex *psit = gsl_vector_complex_calloc(NT);
gsl_vector_complex *temp = gsl_vector_complex_calloc(NT);
gsl_vector_complex *psitc = gsl_vector_complex_calloc(NT);

gsl_complex z;
gsl_complex w;

/* Leo los eigenvalores y eigenvectores, que se encuentran ordenados, al vector eval y
ostringstream ss,ss1, ss2;

ss<<"Evecs_N_"<<N<<"_UO_"<<UO<<".txt";
ss1<<"Eval_N_"<<N<<"_UO_"<<UO<<".txt";

string str(ss.str());
const char* fname = str.c_str();
FILE * f = fopen(fname, "r");

string str1(ss1.str());
const char* fname1 = str1.c_str();
FILE * f1 = fopen(fname1, "r");

gsl_matrix_fread(f,evec);
gsl_vector_fread(f1,eval);

fclose(f);
fclose(f1);

cout << "Eigenvalores y eigenvectores leidos" << endl;

/* Ahora el programa genera el operador número */

i=0;

int n1[NT], n2[NT], n3[NT], n4[NT];

```



```

for(k1=0;k1<=N;++k1)
{
    for(k2=k1;k2<=N;++k2)
    {
        for(k3=k2;k3<=N;++k3)
        {

            n1[i]=k1;
            n2[i]=k2-k1;
            n3[i]=k3-k2;
            n4[i]=N-k3;

            gsl_vector_complex_set(num,i,gsl_complex_rect(n1[i]+n3[i],0));

            ++i;
        }
    }
}

```

```

gsl_vector_complex_scale(num,gsl_complex_rect(n,0));

```

```

cout << "Operador número generado"<< endl;

```

```

// Ahora el programa itera pasos de tiempo. Cada paso se va guardando en el archivo de

```

```

ss2<<"Evol_N_"<<N<<"_U0_"<<U0<<"_T_"<<T<<"_n1_"<<n1[ci]<<"_n3_"<<n3[ci]<<".txt"; //Ar

```

```

string fname2;

```

```

fname2=ss2.str();

```

```

ofstream fout;

```

```

fout.open(fname2.c_str());

```

```

clock_t start, end;

```

```

start=clock();

```

```

for(j=0;j<T;++j)
{

    for(i=0;i<NT;++i)
    {

        for(k=0;k<NT;++k) //guarda el iesimo eigenvector en temp
        {
            gsl_vector_complex_set(temp,k,gsl_complex_rect(gsl_matrix_get(
        }

        gsl_vector_complex_scale(temp, gsl_complex_rect(GSL_REAL(gsl_vector_co
        gsl_vector_complex_scale(temp, gsl_complex_rect(cos(j*gsl_vector_get(e
        gsl_vector_complex_add(psit,temp); // agrega el resultado a psi(t)

    }

    //Ahora psi(t) esta completo, obtengo el valor de expectación

    for(k=0;k<NT;++k) //guarda el complejo conjugado de psi(t) en otro vector
    {
        gsl_vector_complex_set(psitc,k,gsl_complex_conjugate(gsl_vector_comple
    }

    gsl_vector_complex_mul(psit,num); //aplico operador número
    gsl_vector_complex_mul(psit,psitc); //obtengo valor de expectación

    for(k=0;k<NT;++k) //sumo las componentes del nuevo vector para obtener el valo
    {
        num1 += GSL_REAL(gsl_vector_complex_get(psit,k));
    }

    fout << j <<"    " << num1 <<endl;
    num1=0;
    gsl_vector_complex_set_zero(psit);

    prog = j*1.0/T;

    cout<<prog*100<<"% acabado"<<endl;

}

```

```
end = clock();
runtime=((double) (end - start)) / CLOCKS_PER_SEC;

cout << "Realizé " << j << " pasos en " << runtime <<"s"<<endl;

fout.close();

}
```