



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS MATEMÁTICAS Y  
DE LA ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA APLICADA

**Soluciones analíticas de la ecuación no lineal  
de Schrödinger en una dimensión**

**T E S I S A**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
**MAESTRO EN CIENCIAS**

**P R E S E N T A :**  
**JUAN PABLO CORDERO SANTIAGO**

**DIRECTOR:**  
**DR. RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM**

Ciudad Universitaria, CD. MX. Marzo 2022



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



*Dedicado a mi buen amigo  
Javier Alberto Hernández Hernández.*



# Agradecimientos

Agradezco el esfuerzo y acompañamiento de muchas personas, que sin ellas no podrían ser posibles muchos aspectos de mi vida: mi mamá María Esther, mi pareja de vida Ana Patricia, mis hermanos Itzén y Gabriel, a mis amigos y familiares Javier Alberto, Víctor Manuel, Christian y Rafael Alejandro. Le agradezco enormemente a las familias Hernández Leyva, Ruíz Martínez y Jiménez Barón por la amistad y la confianza que me han ofrecido.

Le agradezco a las y los profesores que han contribuido a mi formación; de manera especial al Dr. Alejandro Crespo Sosa y al Dr. Ricardo Méndez Fragoso, que me han enseñado mucho sobre el entendimiento por la Física y las Matemáticas y que, como consecuencia, han contribuido a acrecentar mi gusto por dichas disciplinas.

También tengo que mencionar mi agradecimiento a la Universidad Nacional Autónoma de México, ya que forma una parte muy importante de mi vida, sin ella no hubiera sido posible que pudiera llegar a muchos de los caminos que ahora puedo recorrer.

Nuevamente agradezco al Dr. Ricardo Méndez Fragoso por su orientación en mis estudios de posgrado y en la escritura de este trabajo.

Este trabajo y mis estudios de posgrado fueron posibles gracias al proyecto DGPA PAPIIT IN112721 y a la beca que me otorgó el CONACYT

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. La ecuación no lineal de Schrödinger</b>	<b>3</b>
2.1. Condensado de Bose-Einstein . . . . .	3
2.2. Interacción entre partículas . . . . .	4
2.3. El funcional de Gross-Pitaevskii . . . . .	6
2.4. La ecuación no lineal de Schrödinger . . . . .	6
<b>3. Soluciones analíticas en una dimensión</b>	<b>9</b>
3.1. La partícula libre, solución tipo solitón . . . . .	10
3.2. Pozo de potencial cuadrado . . . . .	12
3.2.1. Caso $\mu < 0$ . . . . .	13
3.2.2. Estado fundamental para $\mu = 0$ . . . . .	15
3.2.3. Primer estado excitado para $\mu = 0$ . . . . .	18
3.3. Pozo de potencial cuadrado con una impureza tipo delta de Dirac . . . . .	20
<b>4. Un breve análisis sobre la ENLS</b>	<b>23</b>
4.1. Pozo de potencial cuadrado con $g \approx 0$ . . . . .	23
4.2. ENLS vs ELS . . . . .	24
<b>5. Conclusiones y trabajo a futuro</b>	<b>27</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>30</b>





# Capítulo 1

## Introducción

El estudio del comportamiento del condensado de Bose-Einstein es un tema de investigación reciente debido a los avances científicos y tecnológicos que conlleva [1]. Por otro lado, en las últimas décadas, los avances experimentales sobre los condensados de Bose-Einstein de gases alcalinos también han generado interés en la descripción matemática de dichos gases [2,3]. El modelo de estudio teórico de un condensado de Bose-Einstein se basa principalmente en la *Ecuación de Gross-Pitaevskii*, también conocida como *Ecuación no lineal de Schrödinger* (ENLS) [4, 5]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) + g|\Phi(x, t)|^2 \right) \Phi(x, t).$$

Donde el término no lineal  $g|\Phi(x, t)|^2$  representa la principal diferencia entre la ecuación lineal de Schrödinger y la ENLS . Veremos que este término implica profundas diferencias entre las soluciones de ambas ecuaciones.

El presente trabajo tiene varios propósitos: mostrar los fundamentos físicos y matemáticos que dan origen a la ecuación no lineal de Schrödinger (capítulo 2), describir técnicas para encontrar algunas de sus soluciones analíticas para una dimensión espacial considerando distintas situaciones: potencial  $V(x) = 0$ , estado base y primer estado excitado para el pozo de potencial cuadrado en el denominado *umbral de deslocalización* y pozo de potencial cuadrado con un potencial de tipo delta de Dirac en el centro (capítulo 3). Las soluciones analíticas encontradas serán la base, para trabajo a futuro, de soluciones numéricas más complicadas que se apegan más a la realidad del comportamiento de un condensado de Bose-Einstein [1].

Estas soluciones analíticas nos darán idea del comportamiento y características de la ENLS y

nos ayudarán a focalizar diferencias puntuales con las soluciones de la ecuación lineal de Schrödinger. En la búsqueda de estas soluciones se utilizaron algunos métodos numéricos para resolver ecuaciones trascendentales o sistemas de ecuaciones no lineales (capítulo 4).

Finalmente, otro de los propósitos de este trabajo es fungir como un preámbulo en investigaciones a futuro como la implementación de técnicas de Análisis Numérico para resolver la ENLS en una dimensión para potenciales  $V(x)$  más complejos [1,6], describir fenómenos como la *localización de Anderson* a través de la ENLS [7], explorar transiciones de fase, estructuras de bandas y explorar la dinámica de extensiones de la ENLS a tres dimensiones espaciales [2].

# Capítulo 2

## La ecuación no lineal de Schrödinger

En este capítulo hablaremos sobre el origen y los fundamentos físicos de la ecuación de Gross-Pitaevskii, también conocida como ecuación no lineal de Schrödinger. Comenzaremos con el concepto de *Condensado de Bose-Einstein*. En principio un condensado de Bose-Einstein es un gas de partículas que se encuentran en el mismo estado cuántico. Este gas puede estar sujeto a un potencial externo  $V(x)$ , y para obtener una descripción más realista del comportamiento de dicho gas podemos introducir en la ecuación de Schrödinger un pseudo potencial derivado de la interacción entre las partículas que componen a dicho gas, esta interacción puede ser atractiva o repulsiva. Al deducir el valor de la energía esperada del gas, considerando la interacción entre las partículas, resulta un funcional de energía del sistema, este funcional se conoce como *funcional de Gross-Pitaevskii*. Por último, utilizando el concepto de potencial químico, que relaciona la variación de la energía de un sistema con respecto al número de partículas que lo componen se obtiene la ecuación no lineal de Schrödinger.

### 2.1. Condensado de Bose-Einstein

Un condensado de Bose-Einstein consiste en un gas cuyas partículas son enfriadas a temperaturas extremadamente bajas, muy cerca del cero absoluto. Estas partículas, al estar a temperaturas tan bajas, tienden a ocupar simultáneamente el nivel más bajo de energía (estado fundamental) [8]. Las partículas que tienen este comportamiento son aquellas cuyo espín es entero (0, 1, 2, ...) y se llaman *bosones*. Este fenómeno ha sido observado, por ejemplo, en gases alcalinos como el

rubidio y el sodio [2, 3].

En resumen, un condensado de Bose-Einstein es un gas de bosones que están en el mismo estado cuántico; entonces puede ser descrito por una misma función de onda [9, 10],

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \psi(x_1)\psi(x_2)\cdots\psi(x_N)e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.1)$$

donde  $\Psi$  es la función de onda de un conjunto de  $N$  partículas y es de cuadrado integrable,  $E$  es la energía total del sistema,  $t$  es el tiempo y cada  $\psi(x_i)$  es una función de onda de una partícula con posición  $x_i \in \mathbb{R}^3$  (para  $i = 1, 2, \dots, N$ ). Cabe mencionar que cada  $\psi(x_i)$  cumple con la condición de normalización

$$\int |\psi(x_i)|^2 d^3x_i = 1. \quad (2.2)$$

Supondremos que el hamiltoniano que describe el comportamiento de dicho conjunto de bosones idénticos es [2]

$$H^{(N)} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(x_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} v(x_i - x_j). \quad (2.3)$$

Aquí  $\hat{p}_i = -i\hbar\nabla$  es el operador cuántico de momento lineal,  $V(x_i)$  es un potencial externo, localmente acotado y que sólo depende de  $x_i$  (en experimentos disponibles  $V(x_i) \sim |x_i|^2$  [10]). El término  $v(x_i - x_j)$  representa un potencial repulsivo entre dos partículas, es esféricamente simétrico, sólo depende de la separación entre ellas y decae más rápido que  $|x_i - x_j|^{-3}$  en el infinito [10]. Por otro lado,  $m$  es la masa de las partículas, las cuales se considerarán idénticas. Nótese que en la ecuación (2.3) el hamiltoniano  $H^{(N)}$  no depende del tiempo; además, la primera suma corresponde al hamiltoniano de la ecuación lineal de Schrödinger para un sistema de  $N$  partículas, mientras que la segunda suma representa la interacción entre parejas de partículas.

## 2.2. Interacción entre partículas

Supongamos un potencial  $v = v(r)$ , donde  $r$  es la distancia de separación de dos objetos, supongamos que este potencial es repulsivo, esféricamente simétrico y que decae a cero más rápido que  $1/r^2$ . Si una partícula tiene una función de onda plana  $\psi(z) = Ae^{ikz}$ , que viaja en una dirección  $z$  y se encuentra con un potencial de este tipo; entonces esto produce una onda esférica saliente,

es decir, se da un fenómeno de dispersión. Las soluciones de la ecuación de Schrödinger de esta situación son de la forma [9]

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

para  $r$  muy grande comparada con el blanco dispersor. El número de onda  $k$  está relacionado con la energía de las partículas incidentes mediante  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ .

La función  $f(\theta)$  se conoce como la *amplitud de dispersión* y describe la probabilidad de dispersión dado un ángulo  $\theta$ . Para encontrar a  $f(\theta)$  es necesario resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial  $v(r)$ . Por otro lado; la ecuación de Schrödinger para un potencial esféricamente simétrico  $v(r)$  admite soluciones separables de la forma  $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ , donde  $Y_l^m(\theta, \phi)$  es un armónico esférico y  $u(r) = rR(r)$  satisface la ecuación radial

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[ v(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu.$$

Ahora, supongamos que  $v(r) = g\delta(r - a)$ , con  $g > 0$  una constante,  $\delta(r - a)$  es una delta de Dirac y  $a$  es la localización de un centro dispersor (una partícula). Si asumimos que la dispersión entre partículas es de baja energía; es decir, que la longitud de onda incidente es mucho más grande que el rango de interacción de  $v(r)$ , entonces el término centrífugo de la ecuación radial puede despreciarse ( $l = 0$ ) [9]. Luego, la ecuación radial es

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + g\delta(r - a)u = Eu. \quad (2.4)$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger para el potencial  $g\delta(r - a)$  hay que tomar en cuenta las siguientes condiciones de frontera:  $\psi$  debe ser continua en  $r = a$  y  $\psi'$  es discontinua en  $r = a$ . Una vez que se resuelve la ecuación Schrödinger para el potencial  $g\delta(r - a)$  y considerando las condiciones antes mencionadas resulta que

$$f(\theta) \approx \frac{-a\beta}{1 + \beta},$$

donde  $\beta = 2mag/\hbar^2$ ; por lo tanto  $\sigma = 4\pi a^2\beta^2/(1 + \beta)^2$ . Tomando  $g = 4\pi a\hbar^2/m$ , obtenemos una aproximación en la que domina el término de potencial de esfera dura.

Si la interacción  $v(x_i - x_j)$  en la ecuación (2.3) se aproxima como un potencial de la forma  $g\delta(r - a)$ , con  $g = 4\pi a\hbar^2/m$  y  $a$  es el rango de alcance de interacción o longitud de dispersión; entonces la ecuación (2.3) describirá el comportamiento de las partículas de un condensado de Bose-Einstein como un conjunto de esferas duras.

### 2.3. El funcional de Gross-Pitaevskii

De las ecuaciones (2.1) y (2.3) se sigue que el valor esperado de la energía es:

$$E = \langle \Psi | H^{(N)} | \Psi \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^N \psi(x_i) \left| H^{(N)} \right| \prod_{i=1}^N \psi(x_i) \right\rangle.$$

Es decir,

$$E = \int \prod_{i=1}^N \psi^*(x_i) \left( \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V(x_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} v(x_i - x_j) \right) \prod_{i=1}^N \psi(x_i) d^3x_1 \cdots d^3x_N$$

Tras aplicar los operadores correspondientes, aproximar el potencial repulsivo entre partículas mediante una delta de Dirac como  $v(x_i - x_j) = g\delta(x_i - x_j)$ , con  $g \geq 0$  una constante, y recordando que las partículas son idénticas y su función de onda cumple con la condición de normalización (2.2); al desarrollar la expresión anterior obtenemos

$$E = N \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(x)|^2 + V(x) |\psi(x)|^2 d^3x + \frac{N(N-1)}{2} \int g \delta(x_i - x_j) \psi^*(x_i) \psi^*(x_j) \psi(x_i) \psi(x_j) d^3x_i d^3x_j.$$

Supondremos que  $N$  es muy grande, por lo que  $N-1 \approx N$ , y tomando  $\phi(x) = \sqrt{N}\psi(x)$ ; finalmente obtenemos

$$E = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(x)|^2 + V(x) |\phi(x)|^2 + \frac{1}{2} g |\phi(x)|^4 d^3x \quad (2.5)$$

A la cantidad expresada en (2.5) se le conoce como *el funcional de Gross-Pitaevskii*.

### 2.4. La ecuación no lineal de Schrödinger

De lo anterior, ahora la condición de normalización (2.2) se puede reescribir como

$$N = \int |\phi(x)|^2 d^3x. \quad (2.6)$$

Por otro lado, para un sistema termodinámico de  $N$  partículas, se define el potencial químico  $\mu$  como el cambio en la energía del sistema con respecto al número de partículas [11]; luego, una variación en la energía  $\delta E$  del estado base del sistema se puede expresar de la siguiente manera:

$$\delta E = \mu_g^{GP} \delta N. \quad (2.7)$$

Donde  $\mu_g^{GP}$  es el potencial químico del sistema y equivale a la energía esperada del estado base del sistema por partícula [10]; es decir, multiplicando la ecuación (2.5) por el factor  $1/N$  se obtiene

$$\mu_g^{GP} = \frac{1}{N} \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi^{GP}(x)|^2 + V(x) |\phi^{GP}(x)|^2 + \frac{1}{2} g |\phi^{GP}(x)|^4 d^3x, \quad (2.8)$$

con  $\phi^{GP}(x)$  la función de onda del estado base para una partícula. Y además, de la definición de la variación de Gateaux [12]:

$$\delta E = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{E(\phi + \varepsilon \phi) - E(\phi)}{\varepsilon} \quad \text{y} \quad \delta N = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{N(\phi + \varepsilon \phi) - N(\phi)}{\varepsilon}.$$

Entonces a partir de la ecuación (2.5) se puede derivar la expresión

$$\delta E = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left\{ \int \frac{\hbar^2}{2m} (|\nabla \phi|^2 + 2\varepsilon \nabla \phi \cdot (\nabla \phi)^* + \varepsilon^2 |\nabla \phi|^2) + V (|\phi|^2 + 2\varepsilon \phi \phi^* + \varepsilon^2 |\phi|^2) + \frac{1}{2} g (|\phi|^4 + 4\varepsilon \phi \phi^* |\phi|^2 + 6\varepsilon^2 |\phi|^4 + 4\varepsilon^3 |\phi|^3 + \varepsilon^4 |\phi|^4) - \left( \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 + V |\phi|^2 + \frac{1}{2} g |\phi|^4 \right) d^3x \right\}$$

Desarrollando y aplicando el límite resulta

$$\delta E = \int \frac{\hbar^2}{m} \nabla \phi \cdot (\nabla \phi)^* + 2V \phi \phi^* + 2g \phi \phi^* |\phi|^2 d^3x \quad (2.9)$$

El primer término del integrando de la ecuación (2.9) se puede reescribir de otra manera gracias a la identidad de Green:

$$\int_U u \nabla^2 v + \nabla u \cdot \nabla v d^3x = \int_{\partial U} u \nabla v \cdot \hat{n} d^2x.$$

Tomando  $u = \phi^*$ ,  $v = \phi$  y considerando que en una región  $U$  del espacio lo suficientemente grande la función de onda  $\phi$  puede tomarse como nula en la superficie  $\partial U$  (condición de frontera necesaria para que se cumpla la condición de normalización); entonces

$$\int \phi^* \nabla \phi \cdot \hat{n} d^2x = 0 \quad \Rightarrow \quad \int \nabla \phi \cdot (\nabla \phi)^* d^3x = - \int \phi^* \nabla^2 \phi d^3x$$

De esta manera, la ecuación (2.9) se puede reescribir como

$$\delta E = \int \left( -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \phi + 2V \phi + 2g |\phi|^2 \phi \right) \phi^* d^3x. \quad (2.10)$$

Ahora bien, desarrollando la ecuación (2.6) se obtiene

$$\delta N = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left( \int |\phi|^2 + 2\varepsilon \phi \phi^* + \varepsilon^2 |\phi|^2 - |\phi|^2 d^3x \right).$$

Por lo tanto,

$$\delta N = \int 2\phi\phi^* d^3x \quad (2.11)$$

Entonces de las ecuaciones (2.7), (2.10) y (2.11) resulta

$$\delta E - \mu_g^{GP} \delta N = \int \left( -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \phi + 2V\phi + 2g|\phi|^2\phi - 2\mu_g^{GP} \phi \right) \phi^* d^3x = 0.$$

De lo anterior se concluye que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V\phi + g|\phi|^2\phi = \mu_g^{GP} \phi. \quad (2.12)$$

A la ecuación (2.12) se le llama *la ecuación de Gross-Pitaevskii independiente del tiempo* o también como *la ecuación no lineal de Schrödinger independiente del tiempo*. Aquí, la constante  $g$  se le conoce como la constante de acoplamiento no lineal y físicamente está relacionada con la longitud de dispersión  $a$  de las partículas y con el número de ellas  $N$ , de manera que  $g \propto aN$  [1, 5]. Además  $a \sim N^{-1}$  [2]. Una observación importante es que si no hay interacciones entre partículas ( $g = 0$ ) se recupera la ecuación usual de Schrödinger, y sus soluciones para el estado fundamental coinciden salvo el factor de normalización  $\phi(x) = \sqrt{N}\psi(x)$  (ver las ecuaciones (2.8) y (2.12)) [3]. Ahora bien, de la expresión anterior se puede inferir que el operador hamiltoniano para el sistema de  $N$  partículas tiene la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) + g|\phi(x)|^2. \quad (2.13)$$

Donde  $x \in \mathbb{R}^3$ . Luego, la ecuación (2.12) se puede escribir como  $\hat{H}\phi(x) = \mu_g^{GP} \phi(x)$ . A partir de la forma de  $\hat{H}$  se tiene que la ecuación no lineal de Schrödinger dependiente del tiempo es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) + g|\Phi(x, t)|^2 \right) \Phi(x, t), \quad (2.14)$$

donde  $\Phi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}$  y  $\phi(x)$  cumple la condición de normalización (2.6). Si  $E = \mu_g^{GP}$ , el potencial químico o la energía del estado base del sistema por partícula; entonces la ecuación (2.14) se reduce a la ecuación (2.12).

Hasta aquí, hemos deducido la ENLS a partir de la descripción física del comportamiento de un condensado de Bose-Einstein y algunas ideas del cálculo variacional; sin embargo, la búsqueda de soluciones de la ecuación (2.12), en una dimensión y para algunos potenciales  $V(x)$ , se tratará en el siguiente capítulo.



# Capítulo 3

## Soluciones analíticas en una dimensión

Durante este capítulo analizaremos la obtención de soluciones analíticas para la ecuación no lineal de Schrödinger (ENLS) en una dimensión espacial. Tal formulación describe, por ejemplo, el comportamiento de ensambles de átomos ultra-fríos en una trampa transversal que los condiciona a un grado de libertad. Esto en esencia es un condensado de Bose-Einstein en una dimensión espacial [1, 6].

Nos enfocaremos principalmente en la obtención de las soluciones de la ENLS independiente del tiempo para un sistema expuesto a distintos potenciales  $V(x)$ . Primero estudiaremos el caso en el que el potencial externo  $V(x) \equiv 0$  en todo el espacio, a tal situación se le conoce como *partícula libre* [9]. Luego, abordaremos el caso en el que  $V(x)$  es un pozo de potencial cuadrado y obtendremos soluciones para el estado base del sistema (estado de menor energía); para esto distinguiremos dos situaciones: cuando el potencial químico del sistema es negativo ( $\mu < 0$ ) y cuando es idénticamente cero ( $\mu = 0$ ).

Es importante destacar que  $\mu = 0$  impone una condición sobre el valor de la constante de acoplamiento no lineal  $g$ ; ya que los estados sometidos a esta situación se hallan cerca del llamado *umbral de deslocalización* [1], lo que influye en el valor de la constante de acoplamiento no lineal  $g$ , e implícitamente en el número máximo de partículas que conforman un condensado de Bose-Einstein sometido a un potencial  $V(x)$ .

En este capítulo, únicamente trataremos el primer estado excitado de la ENLS para  $V(x)$  del tipo pozo de potencial cuadrado y considerando el potencial químico  $\mu = 0$ . Este primer estado excitado corresponde a la solución impar para el sistema en cuestión.

Finalmente abordaremos el caso en el que el potencial químico  $\mu = 0$  y  $V(x)$  tiene la configuración de un pozo de potencial cuadrado con un potencial de tipo delta de Dirac en el centro [1].

### 3.1. La partícula libre, solución tipo solitón

Supongamos que en la ecuación no lineal de Schrödinger, en una dimensión, el potencial externo  $V \equiv 0$ . En esta situación la ENLS tiene solución analítica; y una de las soluciones más simples es la solución tipo solitón, esta consiste en una función en forma de *onda solitaria*. Dicha solución se puede encontrar por medio del método de la *Transformada de dispersión inversa* [4, 13]. Este método se puede consultar en [4] para resolver la versión simplificada de la ENLS independiente del tiempo

$$-\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - 2|\phi(x)|^2\phi(x) = \mu\phi(x), \quad (3.1)$$

donde hemos tomado como ejemplo  $g = -2$ . Las condiciones que se impondrán a la solución serán:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = 0. \quad (3.2)$$

El hecho de que  $g < 0$  implica que la interacción entre las partículas del sistema estudiado es atractiva [4]. Cuando  $g > 0$  la interacción es repulsiva, de acuerdo a lo visto en el capítulo (2), en la formulación del modelo de esferas duras para un condensado de Bose-Einstein.

La solución de tipo solitón del problema anterior es una función hiperbólica:

$$\phi(x) = A \operatorname{sech}(Bx), \quad (3.3)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes. Nótese que  $\phi(x)$  definida en (3.3) cumple con las condiciones dadas en (3.2) y además es continua en todo el espacio. Sustituyendo (3.3) en (3.1) se puede deducir que  $B = A = \phi(0)$  y además

$$-\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} - 2|\phi(x)|^2\phi(x) = -A^2\phi(x).$$

Es decir, el potencial químico está dado por  $\mu = -A^2$ . Por lo tanto, según lo visto en el capítulo 2, la función

$$\Phi(x, t) = A \operatorname{sech}(Ax) e^{iA^2 t} \quad (3.4)$$

cumple con la ENLS dependiente del tiempo:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x, t) - 2|\Phi(x, t)|^2 \Phi(x, t). \quad (3.5)$$

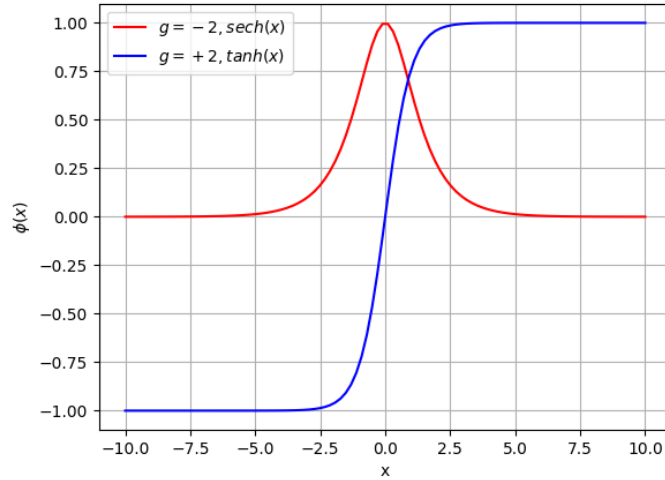


Figura 3.1: Soluciones de tipo solitón de las ecuaciones (3.1) y (3.6) con sus respectivas condiciones (3.2) y (3.7) para  $g = \pm 2$  y  $A = 1$ .

De manera similar se puede tratar la ENLS independiente del tiempo; ahora tomamos como ejemplo  $g = 2$

$$-\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + 2|\phi(x)|^2 \phi(x) = \mu \phi(x), \quad (3.6)$$

con las condiciones

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = \pm A. \quad (3.7)$$

Donde  $A$  es el valor de  $\phi(x)$  en el infinito. La solución de tipo solitón del problema anterior también es una función hiperbólica:

$$\phi(x) = A \tanh(Bx), \quad (3.8)$$

con  $A$  y  $B$  constantes. Mediante (3.6), (3.7) y (3.8) se puede obtener que  $B = A$  y que  $\mu = 2A^2$ . Luego, la función

$$\Phi(x, t) = A \tanh(Ax) e^{-2iA^2 t} \quad (3.9)$$

es solución de la ENLS dependiente del tiempo:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x, t) + 2|\Phi(x, t)|^2 \Phi(x, t). \quad (3.10)$$

Tomando en cuenta la forma de la ecuación (2.14) se puede observar que el cambio en el valor de la constante de acoplamiento no lineal tiene consecuencias importantes en la forma de las soluciones. En la ecuación (3.5)  $g = -2 < 0$ , la parte espacial de la solución (3.4) es una función par que decae a cero muy rápido cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ ; mientras que en (3.10)  $g = 2 > 0$ , la parte espacial de la solución (3.9) es una función impar que es asíntotica a  $\pm A$  cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ . En la figura 3.1 se puede observar las gráficas de las partes espaciales de (3.4) y (3.9). Las soluciones para valores de  $g \neq \pm 2$  tienen una forma similar a las expresiones en (3.4) y (3.9), y para una versión más general se puede consultar la referencia [4].

## 3.2. Pozo de potencial cuadrado

Consideremos la ENLS independiente del tiempo en una dimensión

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) + g|\phi(x)|^2 \phi(x) = \mu \phi(x), \quad (3.11)$$

donde  $V(x)$  es el potencial cuadrado:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| < R_0 \\ 0, & |x| \geq R_0 \end{cases} \quad (3.12)$$

con  $V_0 > 0$  y  $R_0 > 0$ . Si  $\phi(x)$  es solución de la ecuación (3.11); entonces  $\Phi(x, t) = \phi(x)e^{-i\mu t}$  es solución de la ENLS dependiente del tiempo [1]; es decir, es solución de la ecuación

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + V(x)\Phi + g|\Phi|^2 \Phi.$$

En seguida encontraremos las soluciones de (3.11) que representan las funciones de onda para el estado base de un condensado de Bose-Einstein sometido al potencial externo dado por (3.12) y para los casos en que  $\mu < 0$  y  $\mu = 0$ . No abordaremos el caso en que  $\mu > 0$  debido a que en dicha circunstancia no se generan estados discretos y las soluciones que se pueden obtener tienden a un valor fijo distinto de cero cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ ; se dice que dichas soluciones *no están localizadas* [5]. En cambio, cuando  $\mu < 0$  y  $\mu = 0$  las soluciones tienden a cero cuando  $x \rightarrow \pm\infty$  y se obtienen estados discretizados; entonces se dice que estas soluciones están localizadas. Es por esta razón que cuando  $\mu = 0$ , el sistema está cerca del *umbral de deslocalización* [1].

**3.2.1. Caso  $\mu < 0$** 

Supongamos que  $-V_0 < \mu < 0$ , abordaremos el problema por regiones: la región I será  $(-\infty, -R_0]$ , la región II será  $(-R_0, R_0)$  y la región III  $[R_0, +\infty)$ . Comenzaremos con el análisis de la región II y en adelante omitiremos la dependencia de  $\phi$  en  $x$ .

**Región II** Como  $x \in (-R_0, R_0)$ , se tiene que la ecuación (3.11) se puede escribir como

$$\mu\phi = -\frac{1}{2} \frac{d^2\phi}{dx^2} - V_0\phi + g\phi^3. \quad (3.13)$$

Multiplicamos por  $\frac{d\phi}{dx}$  ambos miembros de la ecuación anterior y obtenemos

$$\mu\phi \frac{d\phi}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d^2\phi}{dx^2} \frac{d\phi}{dx} - V_0\phi \frac{d\phi}{dx} + g\phi^3 \frac{d\phi}{dx}.$$

La ecuación anterior es equivalente a

$$\frac{1}{2}\mu \frac{d}{dx} \phi^2 = -\frac{1}{4} \frac{d}{dx} \left( \frac{d\phi}{dx} \right)^2 - \frac{1}{2} V_0 \frac{d}{dx} \phi^2 + \frac{1}{4} g \frac{d}{dx} \phi^4.$$

Al integrar con respecto a  $x$  esta última expresión obtenemos

$$\mu\phi^2 = -\frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{dx} \right)^2 - V_0\phi^2 + \frac{1}{2} g\phi^4 + \frac{E}{2}, \quad (3.14)$$

donde  $E$  es una constante de integración. A partir de la ecuación (3.14) se puede obtener la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d\phi}{dx} = \sqrt{-2(\mu + V_0)\phi^2 + g\phi^4 + E}. \quad (3.15)$$

Una manera de conocer el valor de  $E$  es a través de valores conocidos de  $\phi$  y  $\frac{d\phi}{dx}$  en algún punto; por ejemplo, si  $\phi(0) = 0$  y  $\frac{d\phi}{dx}(0) = \phi_{x0}$ . Entonces de la ecuación (3.15) se obtiene  $E = \phi_{x0}^2$ . Por otro lado, la ecuación (3.15) es una ecuación diferencial separable [14] y resolverla es equivalente a resolver

$$\int_0^\phi \frac{d\tilde{\phi}}{\sqrt{\phi_{x0}^2 - 2(\mu + V_0)\tilde{\phi}^2 + g\tilde{\phi}^4}} = \int_0^x d\tilde{x}. \quad (3.16)$$

Ahora bien, consideremos el cambio de variable  $\xi = \sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0+\mu)}} \tilde{\phi}$  y tomaremos  $\phi_{x0}^2 = \frac{2m(V_0+\mu)^2}{g(1+m)^2}$ ; las cantidades  $\xi$  y  $\phi_{x0}^2$  expresadas así, en términos de un parámetro  $m$ , permiten obtener una expresión equivalente a la ecuación (3.16) pero con la forma estándar de una integral elíptica.

Más adelante veremos que este parámetro  $m$  dependerá de las condiciones impuestas a  $\phi$  en  $x = -R_0$  y  $x = R_0$ . Obsérvese que cuando  $\tilde{\phi} = 0$  se tiene que  $\xi = 0$  y que cuando  $\tilde{\phi} = \phi$  se tiene que  $\xi = \sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0+\mu)}}\phi$ . De esta manera, la ecuación (3.16) se puede escribir como

$$\int_0^{\sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0+\mu)}}\phi} \frac{d\xi}{\sqrt{(1-\xi^2)(1-m\xi^2)}} = \sqrt{\frac{2(\mu+V_0)}{1+m}}x. \quad (3.17)$$

El miembro izquierdo de la ecuación (3.17) corresponde a la integral elíptica de Jacobi de primera especie y al mismo tiempo es la función inversa del seno elíptico de Jacobi [15]; por tanto la ecuación (3.17) también es equivalente a:

$$\operatorname{arcsn} \left( \sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0+\mu)}}\phi \right) = \sqrt{\frac{2(\mu+V_0)}{1+m}}x. \quad (3.18)$$

Por lo tanto; aplicando la función seno elíptico de Jacobi (denotado como  $\operatorname{sn}(\cdot)$ ) a ambos miembros de la ecuación anterior, podemos obtener a  $\phi$  como función de  $x$ :

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2m(\mu+V_0)}{g(1+m)}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2(\mu+V_0)}{1+m}}x \right). \quad (3.19)$$

La función  $\phi(x)$  expresada en (3.19) es solución de la ecuación (3.13), donde  $V(x) = -V_0$ . Esto se puede demostrar sustituyendo (3.17) en (3.13) y teniendo en cuenta las propiedades de las funciones elípticas de Jacobi [15]. Ahora, definimos la cantidad

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1-m\operatorname{sen}^2(\theta)}}, \quad (3.20)$$

donde  $m$  es el parámetro antes mencionado y que se denomina *módulo elíptico*. A  $K(m)$  se le conoce como el cuarto de periodo natural de  $\operatorname{sn}(\cdot)$  [15]. Considerando esto, la función

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2m(\mu+V_0)}{g(1+m)}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2(\mu+V_0)}{1+m}}x + K(m) \right) \quad (3.21)$$

también es solución de (3.13) en la región II.

**Regiones I y III** Primero analizaremos la región III, donde  $R_0 < x$ ; entonces, la ecuación (3.11) toma la forma

$$\mu\phi = -\frac{1}{2}\frac{d^2\phi}{dx^2} + g\phi^3. \quad (3.22)$$

Similarmente al caso de la solución de tipo solitón, podemos proponer como solución una función hiperbólica [1]. En nuestro caso proponemos

$$\phi(x) = \text{Acsch}(Bx + C), \quad (3.23)$$

donde  $A$ ,  $B$  y  $C$  son constantes. Si sustituimos (3.23) en (3.22) obtenemos

$$A = \sqrt{\frac{-2\mu}{g}} \quad \text{y} \quad B = \sqrt{-2\mu}.$$

La constante  $C$  se determina por las condiciones impuestas a  $\phi$  en  $x = R_0$ .

Análogamente al caso de la región III, en la región I (donde  $x < -R_0$ ) se puede probar que

$$\phi(x) = \text{Acsch}(-Bx + C) \quad (3.24)$$

es solución de la ecuación (3.22); con  $A$ ,  $B$  y  $C$  las mismas constantes que se obtienen para el caso de la región III.

De los análisis hechos en las regiones I, II y III se tiene que la solución global de la ecuación 3.11 es

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I = \sqrt{\frac{-2\mu}{g}} \text{csch}(-\sqrt{-2\mu}x + C), & x \leq -R_0 \\ \phi_{II} = \sqrt{\frac{2m(\mu+V_0)}{g(1+m)}} \text{sn}\left(\sqrt{\frac{2(\mu+V_0)}{1+m}}x + K(m)\right), & |x| < R_0 \\ \phi_{III} = \sqrt{\frac{-2\mu}{g}} \text{csch}(\sqrt{-2\mu}x + C), & R_0 \leq x \end{cases} \quad (3.25)$$

De la normalización de  $\phi$  en todo el espacio y de las condiciones impuestas en  $x = \pm R_0$ :

$$\phi_I(-R_0) = \phi_{II}(-R_0), \quad \phi_{II}(R_0) = \phi_{III}(R_0), \quad (3.26)$$

$$\frac{d\phi_I}{dx}(-R_0) = \frac{d\phi_{II}}{dx}(-R_0), \quad \frac{d\phi_{II}}{dx}(R_0) = \frac{d\phi_{III}}{dx}(R_0), \quad (3.27)$$

se obtienen los valores para  $m$  y  $C$ .

Entonces  $\Phi(x, t) = \phi(x)e^{-i\mu t}$ , con  $\phi(x)$  expresada en (3.25), es solución de la ENLS dependiente del tiempo.

### 3.2.2. Estado fundamental para $\mu = 0$

Supongamos que  $\mu = 0$ . Similarmente al caso en que  $\mu < 0$ , analizaremos la ecuación (3.11) (con el potencial  $V$  dado en 3.12) por regiones. Comenzaremos con la región II.

**Región II** En esta región  $V(x) = -V_0$ , se puede utilizar el mismo procedimiento que en el caso de  $\mu < 0$ ; entonces, la solución de la ecuación (3.11) es simplemente

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2mV_0}{g(1+m)}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x + K(m) \right), \quad (3.28)$$

donde  $m$  se determina a partir de las condiciones impuestas a  $\phi(x)$  en  $x = -R_0$  y  $x = R_0$ .

Por otro lado, una de las consecuencias de que  $\mu = 0$  es que el estado fundamental obtenido se encuentra cerca del umbral de deslocalización, ya que todavía existe una discretización en los estados del sistema, algo que no sucede cuando  $\mu > 0$ , ya que esto sería un caso equivalente al de la partícula libre. El hecho de que  $\mu = 0$  conlleva a que el valor de la constante de acoplamiento no lineal  $g$  tome un valor específico que será calculado por medio de la normalización de la función de onda obtenida al resolver la ENLS independiente del tiempo. Este valor de  $g$  es, de hecho, un valor máximo y expresa la máxima cantidad de partículas que pueden ser atrapadas en el pozo de potencial cuadrado debido a que  $g \propto N$ , con  $N$  el número de partículas [1].

**Regiones I y III** Primero analizaremos la región III. En esta situación, la ecuación 3.11 toma la forma

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = 2g\phi^3.$$

Multiplicando por  $\frac{d\phi}{dx}$  ambos miembros de la ecuación anterior obtenemos

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \frac{d\phi}{dx} = 2g\phi^3 \frac{d\phi}{dx} \Rightarrow \frac{d}{dx} \left( \frac{d\phi}{dx} \right)^2 = \frac{d}{dx} (g\phi^4).$$

Integrando con respecto a  $x$  y simplificando resulta lo siguiente:

$$\frac{d\phi}{dx} = \sqrt{g}\phi^2.$$

Esta es una ecuación diferencial separable y tiene como solución [14, 16]

$$\phi(x) = \frac{1}{a + \sqrt{g}x}, \quad (3.29)$$

donde  $a$  es una constante que depende de las condiciones impuestas a  $\phi(x)$  en  $x = R_0$ .

En la región I, donde  $x < -R_0$ , se puede seguir el mismo tratamiento que en la región III, y se obtiene como solución

$$\phi(x) = \frac{1}{a - \sqrt{g}x}. \quad (3.30)$$



Por lo tanto, la solución global de la ecuación (3.11), con  $\mu = 0$ , es

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I = \frac{1}{a - \sqrt{gx}}, & x \leq -R_0 \\ \phi_{II} = \sqrt{\frac{2mV_0}{g(1+m)}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} x + K(m) \right), & |x| < R_0 \\ \phi_{III} = \frac{1}{a + \sqrt{gx}}, & R_0 \leq x \end{cases} \quad (3.31)$$

la normalización de  $\phi$  en todo el espacio y los parámetros  $m$  y  $a$  se pueden obtener a partir de las siguientes condiciones:

$$\phi_I(-R_0) = \phi_{II}(-R_0), \quad \phi_{II}(R_0) = \phi_{III}(R_0), \quad (3.32)$$

$$\frac{d\phi_I}{dx}(-R_0) = \frac{d\phi_{II}}{dx}(-R_0), \quad \frac{d\phi_{II}}{dx}(R_0) = \frac{d\phi_{III}}{dx}(R_0). \quad (3.33)$$

Más aún, podemos obtener el valor de  $m$  independientemente del valor de  $g$ . Para lograr esto utilizamos las propiedades de las funciones elípticas de Jacobi [15] en las expresiones (3.32) y (3.33), para  $x = R_0$ :

$$\frac{1}{a + \sqrt{g}R_0} = \sqrt{\frac{2mV_0}{g(1+m)}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 + K(m) \right), \quad (3.34)$$

$$\sqrt{\frac{m}{g}} \frac{2V_0}{1+m} \operatorname{cn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 + K(m) \right) \operatorname{dn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 + K(m) \right) = -\frac{\sqrt{g}}{(a + \sqrt{g}R)^2}. \quad (3.35)$$

Elevando al cuadrado (3.34) y sustituyendo en (3.35) la siguiente ecuación trascendental [1]:

$$\sqrt{m} = \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 \right). \quad (3.36)$$

Esta ecuación se puede resolver por medio de un método numérico como el método de bisección, de la secante o el método de Newton [17].

De las ecuaciones (3.34) y (3.35) también se puede obtener una ecuación para  $a$ :

$$a = \sqrt{g} \left( \frac{1+m}{\sqrt{2mV_0}} - R_0 \right) \quad (3.37)$$

Por último, la condición de normalización de la función de onda,  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$ , implica la siguiente ecuación para  $g$ :

$$\frac{g}{2\sqrt{V_0}} = -\sqrt{\frac{2}{1+m}} \int_0^{\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0} \frac{\sqrt{1-m\xi^2}}{\sqrt{1-\xi^2}} d\xi + \frac{2}{1+m} \sqrt{V_0} R_0 + \sqrt{2m}. \quad (3.38)$$

La integral en (3.38) es la integral elíptica incompleta de Jacobi de segunda especie [15]. De aquí en adelante, denotaremos dicha integral como  $E(\cdot|m)$ , donde el punto en el argumento de  $E$  indica el límite superior de la integral elíptica y  $m$  es el módulo o parámetro elíptico. Es decir, la integral en la ecuación (3.38) se escribiría como  $E\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}R_0|m\right)$ .

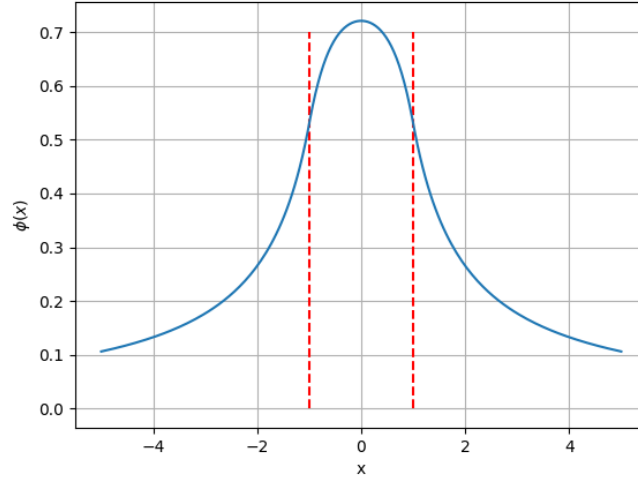


Figura 3.2: Gráfica de la función de onda  $\phi(x)$  correspondiente a la expresión (3.31) para  $R_0 = 1$ ,  $V_0 = 2$ . Las líneas rojas muestran las fronteras entre las regiones I, II y III.

Tras hallar los valores de  $m$ ,  $g$  y  $a$  por medio de (3.36), (3.38) y (3.37) respectivamente; podemos sustituir sus valores en la expresión (3.31) y caracterizar completamente la función de onda  $\phi(x)$ . La figura 3.2 muestra la gráfica de dicha función para  $R_0 = 1$  y  $V_0 = 2$ , donde se obtuvo  $m = 0.84956$ ,  $g = 3.534$  y  $a = 0.00625$ .

Las expresiones dadas en (3.25) y (3.31) son soluciones de la ENLS independiente del tiempo con un pozo de potencial cuadrado para  $\mu < 0$  y  $\mu = 0$  respectivamente. En el caso en que  $\mu < 0$ , el valor de  $g$  es libre; mientras que cuando  $\mu = 0$ , el valor de  $g$  está dado por la ecuación (3.38).

### 3.2.3. Primer estado excitado para $\mu = 0$

El primer estado excitado para  $\mu = 0$  es una función impar que sólo cambia de signo en  $x = 0$  [1]. Para resolver la ecuación (3.11) con el potencial en (3.12), y obtener esta función impar, podemos seguir el procedimiento usado en la subsección anterior, y obtendremos una solución similar a la

ecuación (3.31), la cual es una función impar si omitimos el factor  $K(m)$  en el argumento del seno elíptico y cambiamos de signo la solución para la región I; es decir, obtendremos como solución:

$$\phi(\chi) = \begin{cases} \phi_I = -\frac{1}{a - \sqrt{g^1} R_0 \chi}, & \chi \leq -1 \\ \phi_{II} = \alpha \sqrt{\frac{m_e V_0}{g^1}} \operatorname{sn}(\alpha z_0 \chi), & |\chi| < 1 \\ \phi_{III} = \frac{1}{a + \sqrt{g^1} R_0 \chi}, & 1 \leq \chi \end{cases} \quad (3.39)$$

Donde  $z_0 = \sqrt{V_0} R_0$ ,  $\chi = x/R_0$  y  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m_e}$ ;  $m_e$  es el módulo elíptico correspondiente al primer estado excitado para la ENLS con el potencial cuadrado. La cantidad  $z_0$  actúa como una medida natural del sistema [1] y  $g^1$  es la constante de acoplamiento no lineal para el primer estado excitado. Con estos cambios podemos expresar de manera más sintética la solución buscada de la ENLS independiente del tiempo. Los valores de  $m_e$  y  $a$  son constantes que están sujetas a las condiciones:

$$\phi_I(-1) = \phi_{II}(-1), \quad \phi_{II}(1) = \phi_{III}(1), \quad (3.40)$$

$$\frac{d\phi_I}{dx}(-1) = \frac{d\phi_{II}}{dx}(-1), \quad \frac{d\phi_{II}}{dx}(1) = \frac{d\phi_{III}}{dx}(1). \quad (3.41)$$

De estas condiciones, obtenemos que  $m_e$  debe satisfacer la siguiente ecuación trascendental

$$\operatorname{sn}^2(\alpha z_0) = \frac{1}{1 + m_e}. \quad (3.42)$$

Para el primer estado excitado, en el umbral de deslocalización ( $\mu = 0$ ), al normalizar la función de onda (3.39) en todo el espacio; es decir,  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(\chi)|^2 d\chi = 1$ , se obtiene que el valor para  $g^1$  está dado por:

$$\frac{g^1}{2\sqrt{V_0}} = \alpha^2 z_0 - \alpha E(\alpha z_0 | m_e) + \frac{\sqrt{2m_e}}{1 + m_e}. \quad (3.43)$$

El valor de  $a$  para la solución, también se puede calcular por medio de la ecuación (3.37).

En la figura 3.3 se muestra la gráfica de la solución  $\phi$  para  $V_0 = 2$ ,  $R_0 = 1$  y para el primer estado excitado. De las ecuaciones (3.42) y (3.43) se tiene que  $m_e = 0.090812$ ,  $g^1 = 1.271957$  y  $a = 0.9133844$ .

En la siguiente sección analizaremos a la ENLS para un pozo de potencial cuadrado con un potencial repulsivo de tipo delta de Dirac ubicada en el centro.

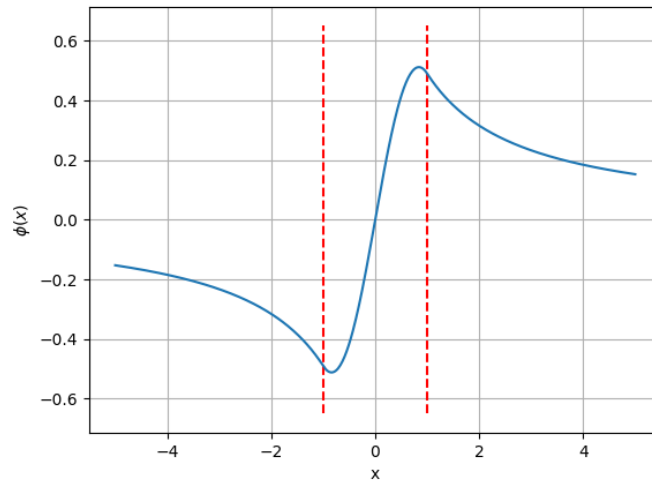


Figura 3.3: Función de onda  $\phi(x)$  correspondiente a la expresión (3.39) para  $R_0 = 1$  y  $V_0 = 2$ . Las líneas rojas muestran las fronteras entre las regiones I, II y III.

### 3.3. Pozo de potencial cuadrado con una impureza tipo delta de Dirac

Ahora analizaremos el caso en el que el potencial químico  $\mu = 0$  y el potencial  $V(x)$  consta de un pozo de potencial cuadrado con una impureza en el centro representada por un potencial de tipo delta de Dirac. Dicho potencial se representa como

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 + \beta\delta(x), & |x| < R_0 \\ 0, & |x| \geq R_0 \end{cases} \quad (3.44)$$

Donde nuevamente  $R_0 > 0$ ,  $V_0 > 0$  y  $\beta$  es una constante. Las soluciones de la ENLS independiente del tiempo en (3.11) con el potencial de (3.44) son similares a las obtenidas en la sección anterior; salvo que ahora hay que considerar que se debe cumplir que la derivada de  $\phi(x)$  debe ser discontinua en el origen debido al potencial delta. Esta condición se expresa de la siguiente manera [1, 9]:

$$\phi'(0) = \beta\phi(0). \quad (3.45)$$

Para satisfacer la ecuación (3.45) podemos reemplazar  $K(m)$  por  $K(m) + \gamma$  en el argumento del

seno elíptico  $\text{sn}(\cdot)$  en la expresión (3.31), donde  $|\gamma| < K(m)$ . Por tanto, la solución resulta:

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I = \frac{1}{a - \sqrt{gx}}, & x < -R_0 \\ \phi_{II} = \sqrt{\frac{2mV_0}{g(1+m)}} \text{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} |x| + K(m) - \gamma \right), & |x| < R_0 \\ \phi_{III} = \frac{1}{a + \sqrt{gx}}, & R_0 < x \end{cases} \quad (3.46)$$

El parámetro  $\gamma$  representa un desplazamiento horizontal de la función de onda con respecto al origen. De las ecuaciones (3.45) y (3.46) se puede deducir la relación que debe satisfacer  $\gamma$ :

$$\sqrt{\frac{2}{1+m}} (1-m) \text{sn}(\gamma) = \frac{\beta}{\sqrt{V_0}} \text{cn}(\gamma) \text{dn}(\gamma). \quad (3.47)$$

donde  $\text{cn}(\cdot)$  y  $\text{dn}(\cdot)$  son funciones elípticas de Jacobi [15] que se pueden definir como

$$\text{cn}(u) = \sqrt{1 - \text{sn}^2(u)} \quad \text{y} \quad \text{dn}(u) = \sqrt{1 - m^2 \text{sn}^2(u)}.$$

Las soluciones de la ecuación (3.11) con el potencial en (3.44) también deben cumplir las condiciones en (3.32) y (3.33). A partir de estas condiciones se puede obtener que el parámetro  $m$  debe satisfacer

$$\sqrt{m} = \text{sn} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 - \gamma \right). \quad (3.48)$$

Para encontrar  $m$  y  $\gamma$  se puede aplicar un método numérico al sistema de ecuaciones no lineales (3.47) y (3.48), como el método de Broyden [17], el cual es una generalización del método de la secante para más de una dimensión.

Por otro lado, al desarrollar la condición de normalización,  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$ , y para el caso en que  $\beta > 0$  (esto denota un potencial delta repulsivo) [1], resulta la siguiente ecuación para  $g$ :

$$\frac{g}{2\sqrt{V_0}} = -\sqrt{\frac{2}{1+m}} \left[ \text{E}(\gamma|m) + \text{E} \left( \sqrt{\frac{2V_0}{1+m}} R_0 - \gamma \middle| m \right) \right] + \frac{m\beta \text{cn}^2(\gamma)}{(1-m)\sqrt{V_0}} + \frac{2\sqrt{V_0}R_0}{1+m} + \sqrt{2m}. \quad (3.49)$$

Por último, para obtener la constante  $a$  también se puede utilizar la ecuación (3.37).

Tras calcular los parámetros  $m$ ,  $\gamma$ ,  $g$  y  $a$ , y utilizando la expresión (3.46) se obtiene la solución  $\phi(x)$  para la ecuación (3.11) con potencial en (3.44) para  $V_0$ ,  $R_0$  y  $\beta > 0$  dados. Por ejemplo, para  $V_0 = R_0 = 1$  y  $\beta = 0.25$  se obtiene que  $m = 0.47002$ ,  $\gamma = 0.3773$ ,  $g = 2.2242$  y  $a = 0.76981$ ; la figura 3.4 muestra la función  $\phi(x)$  correspondiente a los parámetros anteriores. Nótese que

el potencial delta provoca que la derivada de  $\phi(x)$  no sea continua en  $x = 0$  a diferencia de la solución en (3.31) (ver la figura 3.2); esto debido a la condición en (3.45). Sin embargo, la solución en (3.46) también es una función par como lo es la solución en (3.31).

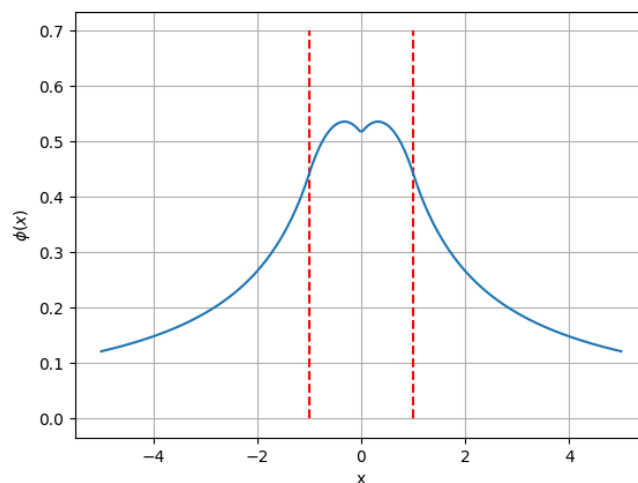


Figura 3.4: Función de onda  $\phi(x)$  correspondiente a la expresión (3.46) para  $R_0 = V_0 = 1$  y  $\beta = 0.25$ . Las líneas rojas muestran las fronteras entre las regiones I, II y III.

# Capítulo 4

## Un breve análisis sobre la ENLS

En el primer capítulo estudiamos la formulación de la ENLS, la cual se obtuvo agregando un término extra al hamiltoniano ordinario de la ecuación lineal de Schrödinger (ELS), lo cual está expresado en la ecuación (2.3). Tal término representa la interacción entre los bosones que conforman un condensado de Bose-Einstein; esta interacción puede ser repulsiva o atractiva, y está íntimamente relacionada con la constante de acoplamiento no lineal  $g$ . Esta constante aparece en el funcional de Gross-Pitaevskii, ecuación (2.5), y en la ENLS independiente y dependiente del tiempo, ecuaciones (2.12) y (2.14)).

Cuando  $g$  es muy cercana a cero, se puede apreciar que al resolver las condiciones de frontera y de normalización impuestas a las soluciones de la ENLS, estas se aproximan a las soluciones de la ecuación lineal de Schrödinger [1, 6]. En este capítulo, observaremos el comportamiento de la ENLS con valores de  $g$  cercanos a cero para el caso del pozo de potencial cuadrado.

También, resaltaremos el hecho de que en general las soluciones de la ENLS no forman un espacio de Hilbert, como en el caso de la ecuación lineal de Schrödinger; es decir, la suma de soluciones distintas de la ENLS no es solución de la ENLS.

### 4.1. Pozo de potencial cuadrado con $g \approx 0$

Al resolver la ENLS con sus correspondientes condiciones de frontera, para el pozo de potencial cuadrado, se obtienen expresiones que no se pueden simplificar cuando se toma directamente como  $g = 0$ ; es decir, a partir de las soluciones obtenidas en el capítulo 3, no se pueden obtener

las soluciones para la ELS simplemente tomando  $g = 0$ . Sin embargo, podemos estudiar el comportamiento de las soluciones de la ENLS cuando  $g$  es pequeña. Analizaremos la ecuación (3.11) con potencial en (3.12) y considerando el caso en que  $\mu < 0$ . La solución a este problema está dada por la ecuación (3.25) con condiciones (3.26) y (3.27), y que junto con la condición de normalización  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$ , forman un sistema de ecuaciones no lineales con incógnitas  $\mu$ ,  $m$  y  $C$ . Tal sistema de ecuaciones se puede resolver mediante el método de Broyden [17] para valores fijos de  $g$ ,  $V_0$  y  $R_0$ . La tabla 4.1 muestra algunos valores de  $\mu$ ,  $m$  y  $C$  para valores dados de  $g$  y con  $V_0 = 1$ ,  $R_0 = 2$ ; de aquí podemos notar que a medida que el valor de  $g$  disminuye, también disminuyen los valores de  $\mu$  y  $m$ . De hecho, la solución de la ELS para el pozo de potencial cuadrado [9] con  $R_0 = 2$  y  $V_0 = 1$ , en el estado base, tiene como eigen-energía  $\mu = -0.83425$ . Esto coincide con el comportamiento del valor de  $\mu$  para la ENLS, y conforme  $g$  se aproxima a cero,  $\mu$  se aproxima al valor de la eigen-energía del estado base para la ELS.

$g$	$\mu$	$m$	$C$
3.41720	-0.08027	0.93586	-0.218448
1.13265	-0.50927	0.71572	-0.216182
0.72076	-0.61366	0.58055	-0.072152
0.56821	-0.65567	0.50755	0.017625
0.4085	-0.70204	0.41057	0.152706
0.1592	-0.78009	0.19696	0.57975
0.10073	-0.79956	0.13147	0.79875
0.0401	-0.82026	0.05545	1.24928
0.00275	-0.83328	0.00395	2.58282

Tabla 4.1:  $\mu$ ,  $m$  y  $C$  para ciertos valores de  $g$  con  $V_0 = 1$  y  $R_0 = 2$ .

## 4.2. ENLS vs ELS

El resolver la ecuación lineal de Schrödinger independiente del tiempo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\phi = E\phi, \quad (4.1)$$



con  $\phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\phi \in L_2(\mathbb{R}^3)$  y con  $V$  un potencial escalar dado, es equivalente a resolver el problema de eigen-valores [9, 18]:

$$\hat{H}\phi = E\phi, \quad (4.2)$$

donde  $\hat{H}$  es el operador de la parte izquierda de la ecuación (4.1). Las funciones que resuelven la ecuación (4.2) se conocen como eigen-funciones y tienen asociados valores específicos de energía  $E$ , conocidos como eigen-energías. Esto trae como ventaja el hecho de que sea posible expresar las soluciones de la ecuación (4.2) como una combinación lineal de las eigen-funciones del operador  $\hat{H}$ . Más aún, las eigen-funciones se pueden ortonormalizar utilizando como producto interior  $\int_{\mathbb{R}^3} \phi_1 \phi_2 d^3x$ , para algunas funciones  $\phi_1$  y  $\phi_2$ . Es decir, el conjunto de soluciones de la ELS independiente del tiempo forman un espacio de Hilbert. Esta cualidad también es propia de la ELS independiente del tiempo para una dimensión [9].

Sin embargo, el caso de la ENLS independiente del tiempo

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V + g|\phi|^2 \right) \phi = \mu\phi, \quad (4.3)$$

es diferente: para un valor fijo  $g \neq 0$  y para un potencial escalar dado  $V$ , las soluciones de 4.3 no forman un espacio de Hilbert. Por ejemplo, supongamos que  $\phi_1$  y  $\phi_2$  son soluciones de la ENLS independiente del tiempo en una dimensión y en su versión simplificada

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V + g|\phi|^2 \right) \phi = \mu\phi, \quad (4.4)$$

con  $\mu_1$  el potencial químico asociado a  $\phi_1$  y  $\mu_2$  el potencial químico asociado a  $\phi_2$ . Entonces, sustituyendo  $\phi_1$  y  $\phi_2$  en (4.4) obtenemos

$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V + g|\phi_1 + \phi_2|^2 \right) (\phi_1 + \phi_2) = \mu_1\phi_1 + \mu_2\phi_2 + 3g(\phi_1^2\phi_2 + \phi_1\phi_2^2). \quad (4.5)$$

El término  $3g(\phi_1^2\phi_2 + \phi_1\phi_2^2)$  de la ecuación anterior no necesariamente es cero [5]; por lo que el hamiltoniano de la ecuación (4.4)

$$\bar{H} = \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V + g|\phi|^2 \right), \quad (4.6)$$

no es un operador lineal. Pero si  $g \approx 0$ , el último término de la ecuación (3.43) es pequeño y la ENLS independiente del tiempo tiene un comportamiento aproximadamente lineal; por lo que para  $g \approx 0$ , la ecuación (4.4) tiene soluciones similares a las de la ELS independiente del tiempo

en una dimensión. De hecho, a partir de las ecuaciones (3.17), (3.20) y (3.25) resulta que, cuando  $g \rightarrow 0$ ,  $m \rightarrow 0$  y se obtienen funciones trigonométricas y exponenciales a partir de funciones elípticas e hiperbólicas respectivamente. Es decir, obtenemos soluciones de la ELS para el pozo de potencial cuadrado.

Para finalizar este capítulo, en la figura 4.1 mostramos el hecho de que se puede tener el estado base y el estado excitado en coexistencia para las mismas condiciones a la frontera del pozo de potencial [1].

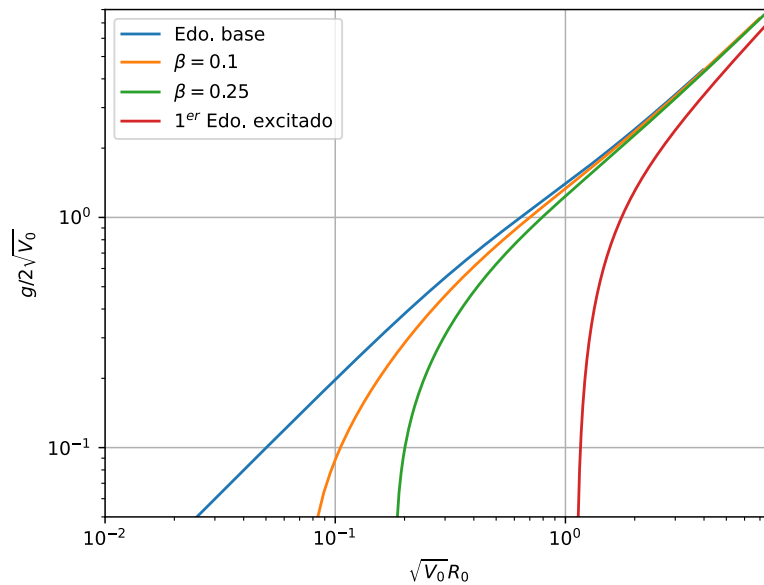


Figura 4.1: Valor de  $g/2\sqrt{V_0}$  como función de  $\sqrt{V_0}R$  (unidad natural) para el estado base, estado base y dos potenciales tipo delta en el centro, y para el estado excitado sin potencial delta.

En la figura 4.1 se observa el valor de  $g$  para el estado base sin potencial delta, estado excitado sin potencial delta, y estado base con dos potenciales delta en el centro con intensidades de 0.1 y 0.25 respectivamente. También se observa que el estado excitado tiene un comportamiento similar al base con un potencial delta, y que podría buscarse una intensidad que lo igualara, pero no es tema de este trabajo. Sin embargo, lo más importante es que después de  $\sqrt{V_0}R = \pi/2\sqrt{2}$  se puede poner una línea vertical y se podrán encontrar para esa configuración tanto el estado base y excitado, cada uno con su propia  $g$  en coexistencia. Este hecho es importante ya que en la ENLS no se esperaba este tipo de comportamiento [1] y que merecerá estudios más profundos en próximos trabajos que realizaré en un futuro.

# Capítulo 5

## Conclusiones y trabajo a futuro

A lo largo de este trabajo hemos estudiado las implicaciones de la constante de acoplamiento no lineal,  $g$ , en la ENLS y sus soluciones. Podemos decir que la existencia de este término, en su modelo teórico, representa una descripción más realista de un condensado de Bose-Einstein que el obtenido a través de la ELS [2, 5]. Por otro lado, las soluciones de la ENLS tienen comportamientos distintos a las soluciones de la ELS, como la aparición de estados no localizados [10]; además del hecho de que las soluciones de la ENLS no puedan formar un espacio de Hilbert; esto debido a que en la ENLS, el operador (4.6) es no lineal. Aún así, para valores de  $g$  cercanos a cero, la ENLS se comporta de manera aproximadamente lineal, y los valores de la energía asociados a los estados encontrados se aproximan a las eigen-energías correspondientes a su contra parte lineal.

Esto último es motivo del uso de métodos numéricos para encontrar soluciones a la ENLS independiente del tiempo [1]; ya que una solución de la ELS puede servir como una primera aproximación de una posible solución de la ENLS para valores de  $g$  muy pequeños, y además representa uno de los temas de investigación a futuro. Otro de los temas de investigación es el estudio de fenómenos como la supresión de ondas debida la presencia de potenciales desordenados, tal fenómeno se conoce como *localización de Anderson* y que se puede presentar en un condensado de Bose-Einstein [7].

Es importante notar que, para la ENLS, se ha encontrado que es posible la coexistencia de estados excitados [1], más específicamente en el caso del pozo de potencial cuadrado del capítulo 4; dicho comportamiento genera interés porque es algo inesperado en la ENLS y es motivo de

investigación a futuro. También se conservan muchas propiedades de sistemas lineales como la estructura de estados aún sin tener el principio de superposición y sus consecuencias. Resultados como estos son importantes para el desarrollo de teoría y técnicas para resolver sistemas no lineales similares como los solitones ópticos y la dinámica de fluidos. Por último, la investigación relacionada a la ENLS también se puede enfocar al estudio de transiciones de fase, estructuras de bandas o extensiones a tres dimensiones espaciales [2].

# Bibliografía

- [1] Méndez Fragoso Ricardo; Cabrera Trujillo Remigio. Confinement effects on an ultra-cold matter wave-packet by square well impurity near the de-localization threshold: analytic solutions, scaling, and width properties. *The European Physical Journal D*, 69, 2015.
- [2] R. Seiringer. *Large Coulomb Systems. Lecture Notes on Mathematical Aspects of QED*. Springer, 2006.
- [3] Dalfovo F.; Giorgini S.; Pitaevskii L.P.; Stringari S. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Review of Modern Physics*, 71, 1999.
- [4] Dmitry E. Pelinovsky. *Localization in Periodic Potentials -From Schrödinger Operators to Gross-Pitaevskii Equations-*. Cambridge University Press, 2011.
- [5] L. D. Carr, K. W. Mahmud, and W. P. Reinhardt. Tunable tunneling: An application of stationary states of bose-einstein condensates in traps of finite depth. *Phys. Rev. A*, 64:033603, Aug 2001.
- [6] Méndez Fragoso Ricardo; Cabrera Trujillo Remigio. Confinement of an ultra-cold-matter wave packet near the delocalization threshold by a waveguide bend with two or more contact impurities. *The European Physical Journal D*, 75, 2021.
- [7] M. Gomes Rafael, et-al. Proposal for anderson localization in transverse spatial degrees of freedom of photons. *Optics Communications, Elsevier*, 498, 2021.
- [8] F. Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. Waveland Press, 2009.
- [9] D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017.

- [10] Lieb Elliot H.; Seiringer Robert; Yngvason Jakob. Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional. *Physical Review A*, 61, 2001.
- [11] M.W. Zemansky and R. Dittman. *Heat and Thermodynamics: An Intermediate Textbook*. Bibliyografiya Ve Indeks. McGraw-Hill, 1981.
- [12] Troutman John L. *Variational Calculus and Optimal Control*. Springer-Verlag, 1995.
- [13] M.J. Ablowitz, M.A. ABLOWITZ, B. Prinari, A.D. Trubatch, London Mathematical Society, N.J. Hitchin, T. Biersteker, C. Brown, P. Cerny, et al. *Discrete and Continuous Nonlinear Schrödinger Systems*. Discrete and Continuous Nonlinear Schrödinger Systems. Cambridge University Press, 2004.
- [14] M. Braun. *Differential Equations and Their Applications: An Introduction to Applied Mathematics*. Applied Mathematical Sciences. Springer New York, 2013.
- [15] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. U.S. Government Printing Office, 1964.
- [16] L. Perko. *Differential Equations and Dynamical Systems*. Texts in Applied Mathematics. Springer New York, 2013.
- [17] M. Heath. *Scientific Computing*. McGraw-Hill Education, 2001.
- [18] Kreyszig. *Introductory Functional Analysis with Applications*. Wiley classics library. Wiley India Pvt. Limited, 2007.