

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física



BEC ESPINORIALES Y SEPARACIÓN DE FASES

TRABAJO DE GRADO

Para optar el título profesional de:

Físico

Carlos Alberto Ordoñez Silva

San Juan de Pasto, Colombia

Junio 2024

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

BEC ESPINORIALES Y SEPARACIÓN DE FASES

Carlos Alberto Ordoñez Silva

TRABAJO DE GRADO

Director:

Christian Jesús Madroñero Carvajal
Maestría en Ciencias Físicas

San Juan de Pasto, Colombia

Junio 2024

©2024 - Carlos Alberto Ordoñez Silva

“Las ideas y conclusiones aportadas en la tesis de grado son responsabilidad exclusiva de los autores”

Artículo 1. del acuerdo No. 324 del 11 de Octubre de 1966, emanado por el Honorable Consejo Directivo de la Universidad de Nariño.

Todos los derechos reservados.

Nota de Aceptación

MSc. Christian Jesús Madroñero Carvajal

Director

Dr. Eduardo Rojas Peña

Jurado

Dr. Edwin Alexander Delgado Insuasty

Jurado

San Juan de Pasto, Junio 2024

Agradecimientos

Quiero expresar mi profundo agradecimiento a mi madre, Luz Marina Ordoñez Silva, a mi hermano, Anderson Daniel Jaramillo Ordoñez, y a toda mi familia por el incondicional apoyo que me han brindado a lo largo de mi carrera y de mi vida. También deseo agradecer a mi asesor de tesis, Christian Jesús Madroñero Carvajal, por su invaluable asistencia en el desarrollo de este trabajo. Por último, pero no menos importante, extendiendo mi gratitud a la Universidad de Nariño por la educación de calidad que me ha proporcionado.

Con mucho amor a mi madre...

BEC ESPINORIALES Y SEPARACIÓN DE FASES

Resumen

Este trabajo presenta un estudio detallado del fenómeno de la separación de fases en un condensado de Bose-Einstein espinorial confinado en una red óptica bidimensional. Las componentes del condensado pueden encontrarse en dos posibles estados hiperfinos con proyecciones de espín $+1$ y -1 . Para modelar el sistema, se propone un potencial de interacción de contacto, el cual está completamente determinado mediante la longitud de dispersión de ondas. Utilizando el esquema de campo medio a temperatura cero, el gas se describe mediante la ecuación de Gross-Pitaevskii. Para resolver esta ecuación, se emplearon métodos numéricos como la evolución en tiempo imaginario y el método de Runge-Kutta de cuarto orden, lo que permite encontrar el estado estacionario del sistema. Una vez encontrado, este estado fue caracterizado como un estado de mezcla o un estado de separación mediante la magnetización del sistema.

El principal resultado de este estudio es la caracterización de la naturaleza del condensado en dependencia del átomo del que este hecho. Se encontró que la naturaleza de un condensado de ^{23}Na es estado de mezcla, mientras que un condensado hecho de átomos de ^{41}K , ^7Li o ^{87}Rb , es estado de separación.

Palabras claves: Condensado de Bose-Einstein, Separación de fase, Ferromagnético, Polar.

SPINORIAL BEC AND PHASE SEPARATION

Abstract

This work presents a detailed study of the phase separation phenomenon in a spinor Bose-Einstein condensate confined in a two-dimensional optical lattice. The components of the condensate can be found in two possible hyperfine states with spin projections of $+1$ and -1 . To model the system, a contact interaction potential is proposed, which is fully determined by the scattering length s . Using the mean-field approach at zero temperature, the gas is described by the Gross-Pitaevskii equation. To solve this equation, numerical methods such as imaginary time evolution and the fourth-order Runge-Kutta method were employed, allowing for the determination of the system's steady-state. Once found, this state was characterized as either a mixed state or a separated state through the system's magnetization.

The main result of this study is the characterization of the nature of the condensate depending on the atom from which it is made. It was found that the nature of a ^{23}Na condensate is a mixed state, while a condensate made of ^{41}K , ^7Li or $^{87}\text{atomsRb}$, is a state of separation.

keywords: *Bose-Einstein condensate, Phase separation, Ferromagnetic, Polar.*

Índice general

1. Introducción	14
2. Planteamiento del Problema	17
3. Objetivos	18
3.1. Objetivo general	18
3.2. Objetivos específicos	18
4. Marco referencial	19
4.1. Formalismo de la Segunda Cuantización	19
4.1.1. El Espacio de Fock	32
4.1.2. Operadores de creación y aniquilación	38
4.1.3. Operadores de campo de creación y aniquilación	50
4.2. Interacciones efectivas y longitud de dispersión	52
5. Ecuación de Gross-Pitaevskii	61
5.1. Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii escalar	61
5.2. Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii espinorial	65
6. Solución numérica a la ecuación de Gross-Pitaevskii	81
6.1. Evolución en tiempo imaginario	81
6.2. Método de Runge-Kutta de cuarto orden	83
6.3. Reducción dimensional de la ecuación de Gross-Pitaevskii	83
6.3.1. Ecuación 2D	84
6.3.2. Ecuación adimensional	87
6.3.3. Constantes	89
7. Resultados	91
8. Conclusiones	100
Referencias	102
ANEXOS	105
A. Condensación de un gas ideal de Bose-Einstein	105
B. Primera Cuantización	118
B.1. Calculo de términos para Primera Cuantización	118

C. Segunda Cuantización	131
C.1. Cálculo de términos para Segunda Cuantización	131
D. CUDA	143
E. Código del programa	147
E.1. Código principal	148
E.2. Código secundario (Kernels)	159

Índice de figuras

7.1.	Se grafica la norma al cuadrado de la función de onda. De izquierda a derecha, se presentan la semilla, el estado estacionario en mezcla y el estado estacionario en separación de fase. Los renglones superior e inferior (rojo y azul) corresponden a la función ψ_1 y ψ_{-1} , respectivamente.	92
7.2.	Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{87}Rb	94
7.3.	Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{23}Na	95
7.4.	Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{41}K	95
7.5.	Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^7Li	96
7.6.	Se presenta el comportamiento de la magnetización a escala de colores al variar a_0 y a_2 para un gas compuesto por átomos de ^{87}Rb	97
7.7.	Se describe el comportamiento de la magnetización izquierda en escala de colores al variar $a_{1,2}$ y $a_{1,1}$, manteniendo $a_{2,2} = 90$, para un gas compuesto por dos átomos diferentes.	98
7.8.	Se describe el comportamiento de la magnetización izquierda en escala de colores al variar $a_{1,2}$ y $a_{2,2}$, manteniendo $a_{1,1} = 70$, para un gas compuesto por dos átomos diferentes.	99
A.1.	La función $g_{3/2}(\lambda)$	115
A.2.	La fugacidad λ como función de $v\Lambda^{-3}$	115
A.3.	La fracción condensada N_0/N como función de la temperatura describe la condensación de Bose-Einstein. Para $T \leq T_c(v)$, esta fracción es diferente de cero, aumentando abruptamente a medida que la temperatura disminuye, y tendiendo a 1 a medida que $T = 0$ se acerca a cero. Sin embargo, para $T \geq T_c(v)$, esta fracción es cero.	117

Índice de cuadros

6.1.	Valor de las constantes para los diferentes átomos descritos a través de parámetros de unidades de energía, longitud y tiempo.	89
6.2.	Parámetros físicos utilizados en la simulación numérica.	90
6.3.	Los átomos se describen mediante varios parámetros, incluyendo su masa y amplitudes de dispersión.	90
7.1.	Parámetros de la simulación numérica.	91

Glosario

Magnetización: Diferencia entre las distintas componentes de espín.

Evolución en tiempo imaginario: Determina la solución de una ecuación diferencial temporal después de un intervalo de tiempo imaginario $\delta\tau$, dada una condición inicial, al reemplazar t por $-i\tau$ en la ecuación diferencial.

Energía de retroceso: Es el cambio en la energía cinética de un átomo que ocurre debido a la emisión o absorción de un fotón con momento k . Este átomo está confinado en una red óptica generada por un láser con longitud de onda λ . La energía de retroceso se expresa como: $E_r = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2$ donde m es la masa del átomo..

Capítulo 1

Introducción

El problema abordado en este trabajo representa un avance significativo en el campo de la materia ultrafría, dado el amplio interés actual en el estudio de gases atómicos diluidos confinados, como se demuestra en el experimento de [Stamper-Kurn et al. \(1998\)](#). En las trampas magnéticas convencionales, los espines de los átomos alcalinos están congelados, lo que hace que, aunque estos átomos posean espines, se comporten como partículas escalares. Sin embargo, en una trampa óptica, los espines de los átomos alcalinos son esencialmente libres, permitiendo manifestar la naturaleza espinorial del condensado de Bose alcalino, como se destaca en el trabajo de ([Ho y Shenoy, 1996](#)).

Debido a la amplia gama de espines hiperfinos de los bosones y a que la interacción atómica depende del espín, estos subestados magnéticos pueden cambiar durante un evento de dispersión. Por lo tanto, resulta de gran interés investigar cómo se organizan los espines en el estado fundamental y explorar la dinámica de mezcla de espines en un condensado de Bose-Einstein (BEC) atrapado ópticamente. Por otro lado, los sistemas de materia ultrafría, particularmente los condensados de Bose-Einstein, han sido reconocidos durante casi dos décadas como simuladores cuánticos de la materia [Gross y Bloch \(2017a\)](#). Esta identificación se debe al paralelismo entre los condensados atrapados en redes ópticas periódicas (o cristales de luz) y su contraparte en el estado sólido, donde los electrones se mueven en redes cristalinas ([Morsch y Oberthaler, 2006](#)). La versatilidad de los gases atómicos ultrafríos como sistemas análogos a los del estado sólido radica en gran medida en la capacidad de controlar la dimensionalidad y los campos externos que influyen en su dinámica. Además, es posible regular las interacciones entre pares de átomos mediante la resonancia de Feshbach ([Tojo et al., 2010](#); [Peil et al., 2003](#)).

El propósito de este trabajo es caracterizar la naturaleza de un condensado espinorial en dependencia del átomo que lo conforma, mediante la observable denominada magnetización.

Se analiza el estado estacionario de condensados formados por gases compuesto por átomos de ^{87}Rb , ^{23}Na , ^{41}K o ^7Li , en dos estados hiperfinos con proyección de espín $+1$ y -1 , confinados en una red óptica bidimensional. En este estudio, se supone que la naturaleza de un condensado de espín 1 depende fundamentalmente del signo de la diferencia entre las longitudes de dispersión de las ondas s . Estas longitudes de dispersión se extrajeron previamente ([Kawaguchi y Ueda, 2012](#); [Stamper-Kurn y Ueda, 2013](#)).

Para alcanzar el objetivo planteado, la descripción del gas espinorial se realizará dentro del esquema de campo medio a temperatura cero, considerando que las interacciones ocurren entre pares de partículas. Estas consideraciones permiten describir el gas espinorial a través de la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). Esta ecuación, bien conocida en la literatura, describe un condensado de Bose con interacciones débiles a temperatura cero. En el transcurso de este trabajo, se podrá apreciar que debido a la naturaleza no lineal de la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP), su resolución únicamente es factible de manera numérica. Aunque este aspecto posee un carácter técnico, también desempeñará un papel destacado en el avance y desarrollo del estudio.

Este trabajo está organizado en ocho capítulos. En los capítulos 2 y 3 se presenta el planteamiento del problema, destacando que el objetivo principal de esta investigación es estudiar la influencia de las longitudes de dispersión de onda s en la separación de fases. Para ello, se realizarán simulaciones numéricas resolviendo la ecuación de Gross-Pitaevskii, con el propósito de determinar el estado estacionario del sistema.

En el capítulo 4, se estudia el formalismo de la segunda cuantización, enfocándose en la descripción teórica del Hamiltoniano de muchas partículas, tanto en primera como en segunda cuantización, especialmente para el caso de los bosones. Se examina el Hamiltoniano en segunda cuantización, el cual describe un sistema de muchos cuerpos con interacciones entre pares de partículas. Como antecedente, se puede consultar el anexo (A), donde se explica brevemente la condensación de Bose-Einstein de un gas ideal. Posteriormente, en el mismo capítulo, se presenta el estudio de la dispersión a bajas energías, introducido como interacciones efectivas y longitud de dispersión. Este análisis lleva a la conclusión de que en el límite

de bajas energías, la longitud de dispersión de onda s contiene toda la información relevante sobre la colisión entre pares. Este hecho sienta las bases para derivar un Hamiltoniano de muchos cuerpos en segunda cuantización, en el cual el término de interacción se representa mediante un potencial de contacto, cuyo coeficiente es proporcional a la longitud de dispersión de onda s .

En el capítulo 5, una vez obtenido el Hamiltoniano correspondiente, se procede a deducir la ecuación de Gross-Pitaevskii sin considerar el espín de las partículas. Este procedimiento se lleva a cabo en el esquema de Heisenberg, con la aproximación de que a temperatura cero el sistema se encuentra en su estado fundamental. Es importante destacar que este estado representa la base del sistema con interacciones, consideradas dentro del marco de la aproximación de campo medio. Por lo tanto, se afirma que la ecuación GP describe un condensado de Bose con interacciones débiles a $T = 0$. Partiendo de la ecuación de GP obtenida, se incorporan efectos del espín. Con estas nuevas consideraciones, se presenta la deducción de las ecuaciones acopladas que describen un condensado de Bose espinorial a temperatura cero, teniendo en cuenta que se trabajará con un gases de átomos de ^{87}Rb , ^{23}Na , ^{41}K o ^7Li en dos estados hiperfinos con proyección de espín $+1$ y -1 .

En el capítulo 6, se detallan los métodos numéricos¹ que se emplearon para resolver el sistema de ecuaciones derivado en el capítulo 5. Se inicia con un análisis sobre cómo varían las constantes de interacción del sistema al trabajar en una red óptica bidimensional. Posteriormente, se lleva a cabo la adimensionalización del conjunto de ecuaciones y se proporcionan los valores numéricos necesarios para obtener el estado estacionario del sistema. En el capítulo 7, se exponen los resultados obtenidos de las simulaciones, donde se observa la caracterización de los átomos. Finalmente, en el capítulo 8 se presentan las conclusiones derivadas del presente trabajo.

¹Se presenta la descripción de las herramientas numéricas que serán empleadas en la resolución de las ecuaciones acopladas no lineales. Dichas herramientas incluyen el método de evolución en tiempo imaginario y el método de Runge-Kutta de cuarto orden. Además, se proporciona una breve descripción del método de cálculo paralelo utilizando CUDA, la cual puede ser revisada en el anexo (D).

Capítulo 2

Planteamiento del Problema

La separación de fases es un tema muy relevante en la actualidad ya que permite hacer predicciones detalladas sobre la naturaleza del estado fundamental de condensado de Bose-Einstein [L. Chen et al. \(1998\)](#), es decir que permite hacer una clasificación conociendo las longitudes de dispersión de ondas s . En consecuencia, es interesante ver como se organizan los espines en el estado fundamental y explorar la naturaleza de la dinámica de mezcla de espines en un condensado de Bose-Einstein atrapado ópticamente.

En particular, en este trabajo de investigación se quiere describir diferentes aspectos que juegan un papel importante en la separación de fases de un sistema cuántico. En este estudio se va a realizar en un condensado Bose-Einstein espinorial, ya que desde el punto de vista experimental dicho sistema es altamente controlable, por lo cual los condensados son conocidos como simuladores cuánticos [Gross y Bloch \(2017b\)](#). Dado el alto control que se tiene sobre el condensado se puede modificar el comportamiento del mismo, es decir, puede pasar de estados miscibles e inmiscibles como se da en el artículo [Papp et al. \(2008\)](#), que utiliza la resonancia de Feshbach de campo magnético ([Tojo et al., 2010](#); [Peil et al., 2003](#)). En concreto este trabajo de investigación lleva a cabo un estudio detallado sobre la naturaleza de condensados espinoriales de diferentes átomos, los cuales pueden clasificarse en tres tipos: “Ferromagnético (F)”, “Polar (P)”, o “Cíclico (C)” ([Ho, 1998](#)).

Esta investigación está a la vanguardia en la comprensión de la separación de fases controlable en condensados de Bose-Einstein espinoriales, ya sea entre especies de átomos diferentes o de la misma especie, lo que radica en las muchas preguntas que aún deben responderse. En particular, el objetivo de la investigación es responder a la siguiente pregunta clave:

¿Cuáles son los enfoques teóricos que permiten obtener una comprensión más profunda de la separación de fases en condensados de Bose-Einstein espinoriales?

Capítulo 3

Objetivos

3.1. Objetivo general

Estudiar el fenómeno de separación de fases en un condensado de Bose-Einstein espinorial.

3.2. Objetivos específicos

Para lograr este objetivo general se proponen los siguientes objetivos específicos:

1. Estudiar desde el punto de vista de la cuántica como se tratan los sistemas de muchos cuerpos.
2. Deducir la ecuación que describe un condensado de Bose-Einstein espinorial.
3. Acondicionar un código que resuelva las ecuaciones acopladas de Gross-Pitaevskii que describen el sistema.
4. Usar la magnetización como observable para caracterizar la separación de fase.
5. Estudiar la separación de fase del estado estacionario del sistema.
6. Caracterizar la naturaleza de un condensado de átomos de rubidio.

Capítulo 4

Marco referencial

4.1. Formalismo de la Segunda Cuantización

En esta sección, se inicia la discusión reformulando la ecuación de Schrödinger, abordando así un problema de muchos cuerpos no relativista. Se consideran N átomos o partículas idénticas, todas con la misma masa. Se introduce un término de interacción y se incorpora un potencial de confinamiento, suponiendo que se presenta en un recipiente de paredes rígidas con un volumen V (Cohen-Tannoudji, Diu, y Laloë, 2019).

El Hamiltoniano asociado a este sistema adopta la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_i^N \left[\frac{\hat{\mathbf{P}}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\hat{\mathbf{r}}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i < j} u(\hat{\mathbf{r}}_{ij}), \quad (4.1)$$

donde $\hat{\mathbf{P}}_i$ denota el operador momentum, m representa la masa, $\hat{V}_{ext}(\hat{\mathbf{r}}_i)$ es el potencial de confinamiento, y $u(\hat{\mathbf{r}}_{ij})$ es el potencial de interacción. Es relevante señalar que el potencial de interacción varía en función de la distancia entre los átomos. No obstante, se supondrá que el potencial de interacción depende únicamente de la distancia entre las partículas i, j , es decir, $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = u(r_{ij}) = V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = g\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Este aspecto se abordará más detalladamente en la sección (4.2). La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \text{ con } |\Psi(0)\rangle \text{ dado.} \quad (4.2)$$

Se define la función de onda para los N átomos de la siguiente manera:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) = \langle r_1, r_2, \dots, r_N | \Psi(t) \rangle, \quad (4.3)$$

con $r_i = (\mathbf{r}_i, \chi_i) \quad \forall \quad i = 1, 2, 3, \dots, N$, donde $\mathbf{r}_i$ indica la posición en el espacio y χ_i

representa la componente de espín de la partícula i . La ecuación de Schrödinger aplicada a la función $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t)$ se expresa de la siguiente manera:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) = \hat{H} \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t). \quad (4.4)$$

Ahora se propone que la función de onda sea una superposición de funciones, utilizando la base del gas ideal de bosones, expresada de la siguiente manera:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t) = \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (4.5)$$

donde la función de onda $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, t)$ se expresa como la suma sobre todos los números de ocupación que sumen N , multiplicada por las $\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ correspondientes a esos números de ocupación, y adicionalmente multiplicada por un coeficiente $C_{\{n'\}}(t)$.

Base de gas ideal de Bosones

Es una función simétrica ante el intercambio de cualquier par (r_i, r_j) , y se expresa de la siguiente manera:

$$\Phi_{\{n\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sqrt{\frac{n_0!n_1!\dots n_\infty!}{N!}} \sum_{perm} \phi_\alpha(r_1) \phi_\beta(r_2) \dots \phi_\gamma(r_N), \quad (4.6)$$

el término de la raíz, $\sqrt{\frac{n_0!n_1!\dots n_\infty!}{N!}}$, constituye la normalización de la expresión. La etiqueta $\{n\} = (n_0, n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots, n_\gamma, \dots, n_\infty)$ representa el número de ocupación de todos los valores de las etiquetas n_k . Cada etiqueta se corresponde con los cuatro números cuánticos de los estados de un átomo, donde n_k indica el número de átomos en el estado k de un átomo, con $k = (\mathbf{k}, \sigma)$;

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y, \mathcal{M}_z) \text{ con } \mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y, \mathcal{M}_z \in \mathbb{Z}, \quad (4.7)$$

$$\sigma = -s, -s-1, \dots, s-1, s,$$

donde k representa los cuatro números cuánticos y las funciones ϕ_k están definidas por:

$$\phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \chi | \sigma \rangle, \quad (4.8)$$

donde el término $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ denota una función de onda con condiciones periódicas en la frontera, y $\langle \chi | \sigma \rangle$ representa el traslape entre el estado σ y el estado χ . Aquí, ϕ_k representa una base completa y ortonormal, lo que implica que satisface la siguiente relación:

$$\int d^3r \phi_k^*(r) \phi_{k'}(r) = \delta_{k,k'}. \quad (4.9)$$

Además, por supuesto, se cuenta con la siguiente expresión:

$$\sum_{k=0}^{\infty} n_k = N, \quad (4.10)$$

lo cual es válido, dado que se considera un conjunto de N bosones. El símbolo $\sum_{perm}$, en la ecuación (4.6), denota la suma sobre todas las permutaciones de índices distintos, con $n_k \neq 0$ en el conjunto $\{n\}$. Para ilustrar, consideremos un escenario con tres partículas ($N = 3$), donde todas las $n_k = 0$ para $k \neq \alpha$, $k \neq \beta$ y $\alpha \neq \beta$. En este caso, la función de onda Φ se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \Phi_{\{n_\alpha=2, n_\beta=1\}}(r_1, r_2, r_3) &= \sqrt{\frac{n_\alpha! n_\beta!}{3!}} \sum_{perm} \phi_\alpha(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3), \\ &= \sqrt{\frac{2!1!}{3!}} [\phi_\alpha(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) + \phi_\beta(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) \\ &\quad + \phi_\alpha(r_1) \phi_\beta(r_2) \phi_\alpha(r_3)], \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} [\phi_\alpha(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) + \phi_\beta(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) \\ &\quad + \phi_\alpha(r_1) \phi_\beta(r_2) \phi_\alpha(r_3)], \end{aligned}$$

entonces,

$$\begin{aligned} \Phi_{\{n_\alpha=2, n_\beta=1\}}(r_1, r_2, r_3) &= \sqrt{\frac{1}{3}} [\phi_\alpha(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) + \phi_\beta(r_1) \phi_\alpha(r_2) \phi_\beta(r_3) \\ &\quad + \phi_\alpha(r_1) \phi_\beta(r_2) \phi_\alpha(r_3)]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

En esta expresión, el factor $\sqrt{\frac{1}{3}}$ indica el inverso del número total de permutaciones posibles. Es fundamental destacar que solo se contemplan las permutaciones entre índices distintos, puesto que las permutaciones entre índices idénticos no tienen relevancia.

Mecánica cuántica de muchos cuerpos y la Primera Cuantización

Teniendo en cuenta los elementos de la base de gas ideal de bosones descritos anteriormente, el objetivo consiste en determinar la ecuación que satisfaga los coeficientes $C_{n'}(t)$. Para lograrlo, al sustituir la ecuación (4.5) en (4.4), se obtiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \hat{H} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (4.12)$$

Multiplicando ambos lados de la igualdad en la ecuación (4.12) por su conjugado y llevando a cabo la integración, se obtiene:

para el lado izquierdo de la igualdad,

$$\iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi^*(r_1, r_2, \dots, r_N) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (4.13)$$

para el lado derecho de la igualdad,

$$\iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{H} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N). \quad (4.14)$$

Primero, abordemos la expresión (4.13). Al reorganizar los términos, se obtiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N). \quad (4.15)$$

Utilizando la relación de ortonormalización dada por:

$$\iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n'\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \Phi_{\{n\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) = \delta_{\{n\}\{n'\}}, \quad (4.16)$$

la ecuación (4.15) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \underbrace{\iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N)}_{=\delta_{\{n\}\{n'\}}} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \delta_{\{n\}\{n'\}}. \end{aligned}$$

Observando que la delta de Kronecker $\delta_{\{n'\}\{n\}}$ restringe la sumatoria $\sum_{\{n'\}}$ para $\{n'\} = \{n\}$, es decir:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \delta_{\{n'\}\{n\}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t),$$

por consiguiente, para el lado izquierdo se tiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t). \quad (4.17)$$

Centrándose en la expresión (4.14) y reordenando los términos, para el lado derecho se obtiene:

$$\sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{H} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t), \quad (4.18)$$

utilizando la expresión $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$, donde $\hat{T}$ representa la energía cinética y $\hat{V}$ la energía potencial de las interacciones entre dos átomos, se obtiene:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) (\hat{T} + \hat{V}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\ &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{T} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\ &+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{V} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Dado que la ecuación del lado izquierdo (4.17) es igual a la expresión del lado derecho (4.19), se puede concluir que:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{T} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\ &+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \hat{V} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t), \end{aligned} \quad (4.20)$$

en esta expresión, la energía cinética $\hat{T}$ se define como $\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m}$, donde en la base de coordenadas $\hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar\nabla_i$, adquiere la forma $\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2\nabla_i^2}{2m}$. Para el potencial de interacción $\hat{V}$, toma la forma $\hat{V} = \sum_{i<j} u(r_{ij}) = \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij})$, donde $u(r_{ij})$ representa

la interacción entre cada par de partículas, contadas una vez, explicando así el factor de $1/2$. La suma doble recorre los índices i y j por separado, excluyendo el caso donde i es igual a j . Al rescribir (4.20), obtenemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\ &\times \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\ &+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\ &\times \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t). \end{aligned}$$

Al aplicar el término del laplaciano $\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$ a $\Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N)$ y considerar la relación (4.8) en (4.6), se obtiene que:

$$\nabla_i^2 \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) = -k_i^2 \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N).$$

En resumen, podemos expresarlo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\ &\times \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \underbrace{(\nabla_i^2 \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N))}_{=-k_i^2 \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N)} C_{\{n'\}}(t) \\ &+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\ &\times \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\hbar}^2}{2m} (-k_i^2 \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N)) C_{\{n'\}}(t) \\
&+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\hbar}^2 k_i^2}{2m} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\
&+ \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Para el primer término, la primera sumatoria y las integrales pueden reorganizarse dentro de la otra sumatoria sin afectarlas, dado que no comparten índices iguales. Es decir, podemos expresarlo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\hbar}^2 k_i^2}{2m} \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times C_{\{n'\}}(t) + \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\times \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} u(r_{ij}) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}
\tag{4.21}$$

utilizando la relación de ortonormalización dada por la expresión (4.16), se obtiene:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\hbar}^2 k_i^2}{2m} \sum_{\{n'\}} \underbrace{\iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N)}_{\delta_{\{n'\}\{n\}}} \times \\
&\quad \times C_{\{n'\}}(t) + \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \underbrace{u(r_{ij})}_{i \neq j} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t), \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\hbar}^2 k_i^2}{2m} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \delta_{\{n'\}\{n\}} + \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \underbrace{u(r_{ij})}_{i \neq j} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

en el primer término de la igualdad, la delta de Kronecker $\delta_{\{n'\}\{n\}}$ restringe la sumatoria $\sum_{\{n'\}}$ para $\{n'\} = \{n\}$. Se puede cambiar la suma $\sum_{i=1}^N$ por $\sum_{k=0}^{\infty}$, que asume la expresión dada por (4.10). En otras palabras, la expresión anterior se reescribe de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= C_{\{n\}}(t) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{\hbar}^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k + \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \underbrace{u(r_{ij})}_{i \neq j} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Ahora, al emplear la ecuación (4.6), el segundo término del lado derecho de la expresión anterior adquiere la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_{\{n\}}^*(r_1, r_2, \dots, r_N) \times \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u(r_{ij})}_{i \neq j} \Phi_{\{n'\}}(r_1, r_2, \dots, r_N) C_{\{n'\}}(t) \\
&= \sum_{\{n'\}} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_{perm} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \times \\
&\quad \times \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u(r_{ij})}_{i \neq j} \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sum_{perm'} \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) C_{\{n'\}}(t), \\
&= \frac{1}{2} \sum_{perm'} \sum_{perm} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\
&\quad \times \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) u(r_{ij}) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N),
\end{aligned}$$

es decir, este segundo término se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{perm'} \sum_{perm} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\
&\quad \times \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \iint \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) u(r_{ij}) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N).
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Para abordar la expresión (4.23), que corresponde a la energía potencial de interacción, como ejemplo particular se considera el caso en el que $i = 3$ y $j = 15$, lo que implica que el potencial se expresa como $u(r_{3,15})$. En este contexto, las integrales respecto a dr_3 y dr_{15} están asociadas al potencial de interacción. Por otro lado, las integrales respecto a $dr_1 dr_2 \dots dr_N$, que no están involucradas en el potencial, se integrarán y, debido a la ortonormalización de los estados, se reducirán a uno.

Dicho de otra manera, el tratamiento resulta en una integral doble con diferenciales dr_3 y dr_{15} , donde el potencial $u(r_{3,15})$ queda “sandwichado” entre dos términos. Uno de ellos im-

plica dos funciones ϕ^* conjugadas, mientras que el otro implica funciones ϕ sin conjugación multiplicadas por la constante $C(t)$. Es relevante destacar que las funciones $\Phi_{\{n'\}}$ incorporan las funciones ϕ_k , cuya ecuación se proporciona en la expresión (4.6). Es importante tener en cuenta que la expresión (4.23) cuenta con $\{n\}$ fija y con $\{n'\}$, que al variar se ajusta para aquellas que van siendo diferentes de cero. En términos generales, podemos definir la siguiente expresión:

$$\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \equiv \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_2}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j). \quad (4.24)$$

En el lado izquierdo de la igualdad, $u(r_{ij})$ representa el operador $\hat{u}$ en la base de las coordenadas, que está “sandwichado” entre funciones conjugadas y no conjugadas. Por otro lado, en el lado derecho de la igualdad, se deben tener en cuenta los diferentes valores de k para los cuales la integral es diferente de cero.

Se puede observar que el papel de k_1 y k_2 es crucial y pueden intercambiarse sin afectar el resultado, dado que el operador $\hat{u}$ solo depende de la distancia. Es decir, intercambiar i por j no tiene efecto; esto se hace para simplificar el problema. De este análisis surgen ocho casos, los cuales dependen de los valores de cada par de k_1, k_2, k_3 y k_4 . Por ejemplo, si todos los valores son diferentes ($k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4$), este sería un caso. Sin embargo, también puede ocurrir que $k_1 = k_2$ y $k_3 = k_4$, entre otras combinaciones. Lo que determinará qué término sobrevive es la doble integral. Por tanto, se pueden identificar ocho casos distintos de interacción, según las combinaciones posibles de los valores de los índices.

$$\left. \begin{aligned} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_2}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j) \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_2}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_3}(r_j) \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_2}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_1}(r_i) \phi_{k_1}(r_j) \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_2}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_1}(r_i) \phi_{k_3}(r_j) \end{aligned} \right\} \equiv V_1, \quad (4.25)$$

$$\left. \begin{aligned} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_1}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j) \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_1}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j) \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_1}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j) \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle &= \iint dr_i dr_j \phi_{k_1}^*(r_i) \phi_{k_1}^*(r_j) u(r_{ij}) \phi_{k_3}(r_i) \phi_{k_4}(r_j) \end{aligned} \right\} \equiv V_2. \quad (4.26)$$

Los términos se han clasificado de la siguiente manera: se definen cuatro términos para V_1 y otros cuatro para V_2 . En el caso de V_1 , los bra son distintos, mientras que en el caso de V_2 , los bra son idénticos. Por lo tanto, los ket se reorganizan de acuerdo con esta clasificación, como se puede apreciar en las expresiones (4.25) y (4.26).

En el primer caso de V_1 , se procede a calcular el término asociado a $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle$. Por lo tanto, en este escenario, la ecuación (4.23) adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \\ & \times \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Al dividir las integrales de esta manera, se asegura que las primeras integrales n_α sean iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar su anulación, ya que las funciones ϕ_k son ortonormales siempre que

$$\alpha \neq k_1, k_2, k_3, k_4.$$

Sin embargo, al separar las integrales según se muestra en la ecuación (4.27), se debe quitar un n_{k_1} y n_{k_2} de las $\{n\}$ dadas, lo que lleva a la configuración

$$\{n\} = (n_0, \dots, n_{k_1} - 1, n_{k_2} - 1, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

y de manera similar, se quita un n'_{k_3} y n'_{k_4} de $\{n'\}$, generando la configuración

$$\{n'\} = (n'_0, \dots, n'_{k_1}, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales no sean nulas, se requiere que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1} - 1, \quad n'_{k_2} = n_{k_2} - 1, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 1, \quad n'_{k_4} = n_{k_4} + 1.$$

Además, la suma $\underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j}$ tiene dos casos independientes de permutación:

$$\text{si } k_1 \neq k_2 \text{ entonces se tiene } n_{k_1} n_{k_2},$$

si $k_1 = k_2$ entonces se tiene $n_{k_1}(n_{k_1} - 1)$.

Teniendo en cuenta todos estos elementos anteriores, la ecuación (4.27) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)!(n_{k_2} - 1)!(n_{k_3} + 1)!(k_4 + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \sum_{perm} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (4.28)$$

En la expresión, las sumas $\sum \sum \sum \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4}$ inicia desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones, como se ilustra en el ejemplo de $N = 3$ partículas (véase la ecuación (4.11)), representa el número total de permutaciones:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)!(n_{k_2} - 1)!(n_{k_3} + 1)!(k_4 + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el primer término de los diversos casos de V_1 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle$, se identifica:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\ & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Centrándose únicamente en el término de energía potencial de interacción de la ecuación (4.23) y los cuatro términos de V_1 (ver anexo (B.1)), se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_3} + 2)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} (n_{k_1} + 1) n_{k_2}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}+1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_\infty)}(t) \equiv V'_1.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Todas las contribuciones de V_1 se definen como V'_1 (ver anexo ecuación (B.287)).

Al centrarse únicamente en el término de energía potencial de interacción de la ecuación (4.23) y los cuatro términos de V_2 (consulte el anexo (B.1)), se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} (n_{k_1} - 1) (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-2, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} (n_{k_1} - 1) (n_{k_3} + 1) (n_{k_3} + 2)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-2, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} (n_{k_1} - 1) (n_{k_1} - 1) (n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{(n_{k_1} - 1) (n_{k_1} - 1) n_{k_1} n_{k_1}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t) \equiv V'_2.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Todas las contribuciones de V_2 se definen como V_2' (ver anexo ecuación (B.304)).

Por tanto, al sustituir las expresiones deducidas en (4.31) y (4.32) en la ecuación (4.21), se obtiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) = C_{\{n\}}(t) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k + V_1' + V_2' \quad (4.33)$$

$$\forall \{n\} \text{ tal que } \sum_{k=0}^{\infty} n_k = N \text{ y con } C_{\{n\}}(0) \text{ dado.}$$

La ecuación (4.33) se presenta como la ecuación de Schrödinger para coeficientes, también conocida como tratamiento de **Primera Cuantización**, lo que da lugar a un conjunto infinito de ecuaciones lineales acopladas.

Es importante destacar que este formalismo, conocido como la **Segunda Cuantización**, no introduce de ninguna manera una nueva teoría ni nuevos principios físicos que difieran de los de la mecánica cuántica convencional. La única uantización que se realiza es cuando se consideran las partículas como objetos cuánticos. Por lo tanto, el marco conceptual de la segunda cuantización se encuentra en la mecánica cuántica estándar. A continuación, se procederá a construir el espacio Fock a partir del espacio de estados más simple, correspondiente a una sola partícula.

4.1.1. El Espacio de Fock

Dentro del marco de la mecánica cuántica, se cuenta con el espacio de estados de una sola partícula, representado por $\mathcal{H}$, así como el espacio $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$ que describe n partículas idénticas, simetrizado adecuadamente con $v = 1$ para bosones. Para construir el espacio de estados que contempla un número variable de partículas, se considera la colección de todos los espacios $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$ con

$$n = 1, 2, \dots, \infty.$$

Introducimos entonces el espacio unidimensional de cero partículas, denotado por $\mathcal{H}^0$, de la siguiente manera:

$$\mathcal{H}^0 = \lambda |\Phi(0)\rangle \text{ tal que } \lambda \in \mathbb{C}, \quad (4.34)$$

en este espacio, se incluye un único vector $|\Phi(0)\rangle$, supuesto normalizado a uno. Este estado, denominado como el estado vacío, se denota simplemente como $|\Phi(0)\rangle \equiv |0\rangle$. Un estado en el cual el número de partículas no está fijo se representa mediante una sucesión:

$$|\Psi\rangle \equiv \{|\Psi(0)\rangle, |\Psi(1)\rangle, |\Psi(2)\rangle, \dots, |\Psi(n)\rangle\} = \{|\Psi(n)\rangle\}_n, \quad (4.35)$$

en esta representación, para cada n , $|\Psi(n)\rangle$ es un elemento de elemento $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$. La suma de dos de estos estados, $|\Phi\rangle = \{|\Phi(n)\rangle\}_n$ y $|\Psi\rangle = \{|\Psi(n)\rangle\}_n$, así como la multiplicación por un escalar λ , están definidas por:

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle + |\Psi\rangle &= \{|\Psi(n)\rangle + |\Phi(n)\rangle\}_n, \\ \lambda|\Phi\rangle &= \{\lambda|\Phi(n)\rangle\}_n, \end{aligned} \quad (4.36)$$

respectivamente, y el producto interno es dado por:

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\Phi(n)|\Psi(n)\rangle, \quad (4.37)$$

donde $\langle\Phi(n)|\Psi(n)\rangle$ es el producto escalar en $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$. La colección de todos los vectores expresada en (4.35) tiene norma finita, es decir:

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\Phi(n)|\Phi(n)\rangle = C, \quad (4.38)$$

siendo C un numero finito.

Formando así el espacio de Hilbert $\mathcal{F}_v(\mathcal{H})$, también conocido como espacio de Fock. Si definimos un vector $|\Psi\rangle$ por medio del conjunto de sus componentes en los espacios $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$, podemos considerar $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$ como aquellos subespacios en $\mathcal{F}_v(\mathcal{H})$ que abarcan los vectores

$0, \dots, 0, \dots, |\Psi(n)\rangle, 0, \dots$, donde solo la componente n difiere del vector nulo en su respectivo espacio. Estos vectores, tratados como elementos del espacio de Fock, se denotarán simplemente como $|\Phi(n)\rangle_n$, y utilizando la expresión (4.37), su producto escalar se anula para distintos números de partículas,

$$\langle \Phi(n) | \Psi(m) \rangle = 0 \text{ para } n \neq m. \quad (4.39)$$

Como consecuencia, todos los pares de estos subespacios son ortogonales en $\mathcal{F}_v(\mathcal{H})$. Por lo tanto, $\mathcal{F}_v(\mathcal{H})$ se presenta como una suma directa de $\mathcal{H}_v^{\otimes n}$.

$$\mathcal{F}_v(\mathcal{H}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_v^{\otimes n}, \quad (4.40)$$

Además, $|\Psi\rangle$ puede expresarse como la suma $|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\Psi(n)\rangle$ de sus componentes ortogonales $|\Psi(n)\rangle$. La notación $\mathcal{F}_v(\mathcal{H})$ destaca que, al seleccionar una partícula $\mathcal{H}$ determinada por la física del fenómeno. El espacio de Fock asociado se obtiene automáticamente mediante la construcción mencionada.

Ahora, siguiendo el principio de simetrización para $v = 1$, se denota de la siguiente manera: $\mathcal{H}_+^{\otimes n} = \mathcal{S}_+ \mathcal{H}^{\otimes n}$, donde se define el operador $\mathcal{S}_+$, como;

$$\mathcal{S}_+ = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} P_{\pi}, \quad (4.41)$$

donde la suma $\pi \in \mathcal{P}_n$ está hecha sobre todas las $n!$ permutaciones pertenecientes a $\mathcal{P}_n$.

Estados de Fock o “de número de ocupación” (number states)

El estado simétrico $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$ corresponde a productos de los estados de una partícula $|\varphi\rangle$ en $\mathcal{H}$, y se expresan como:

$$|\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\rangle_+ = \mathcal{S}_+ |\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\rangle. \quad (4.42)$$

Dado que $\mathcal{S}_+$ es hermítico, el producto escalar de dos de estos estados debería ser:

$$\begin{aligned} {}_+\langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle_+ &= \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \mathcal{S}_+^* \mathcal{S}_+ | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle, \\ &= \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | (\mathcal{S}_+)^2 | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle, \end{aligned} \quad (4.43)$$

como $\mathcal{S}_+$ es un proyector y, según la definición en la expresión (4.41), obtenemos:

$$\begin{aligned} &\langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \mathcal{S}_+ | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle, \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} (+1)^\pi \langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \phi_{\pi(1)}, \dots, \phi_{\pi(n)} \rangle, \end{aligned} \quad (4.44)$$

reordenando los productos internos obtenemos,

$${}_+\langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle_+ = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} (+1)^\pi \langle \varphi_1 | \phi_{\pi(1)} \rangle \dots \langle \varphi_n | \phi_{\pi(n)} \rangle. \quad (4.45)$$

Considerando un sistema de n partículas idénticas, se parte de una base $\{|\psi_r\rangle\}$ en el espacio de estados de una partícula. Luego, construimos la base $\{|\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle\}$ en el espacio producto tensorial $\mathcal{H}^{\otimes n}$. Sin embargo, dado que el espacio de los estados físicos del sistema no es simplemente $\mathcal{H}^{\otimes n}$, sino más bien $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, surge la pregunta de cómo determinar una base en este espacio de estados físicos.

Al aplicar el operador $\mathcal{S}_+$ a los kets de la base $\{|\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle\}$ de $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, podemos obtener un conjunto de vectores que generan $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$. Sea $|\psi\rangle$ un ket arbitrario de $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, como $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_+^{\otimes n}$, podemos expandirlo en la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{r_1, r_2, \dots, r_n} a_{r_1, r_2, \dots, r_n} |\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle. \quad (4.46)$$

Dado que $|\psi\rangle$, por hipótesis, pertenece a $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, podemos expresar $\mathcal{S}_+ |\psi\rangle = (+1)^\pi |\psi\rangle$, aplicando el operador $\mathcal{S}_+$ a ambos lados de la ecuación (4.46). Esto muestra que $|\psi\rangle$ puede expresarse como una combinación lineal de los kets $\mathcal{S}_+ |\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle$. Ahora, al permutar los roles de varias partículas en uno de los kets $|\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle$ de la base inicial antes de aplicar $\mathcal{S}_+$. En este nuevo ket, la aplicación de $\mathcal{S}_+$ conduce al mismo ket de $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$. Introducimos el concepto de estados de ocupación normalizados a uno, los cuales están definidos por:

$$|n_1, n_2, \dots, n_r, \dots, n_\infty\rangle_+ = \sqrt{\frac{n!}{n_1!n_2!n_3!\dots n_\infty!}} \mathcal{S}_+ |\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle, \quad (4.47)$$

donde n_r representa el número de ocupación del estado individual $|\psi_r\rangle$, siendo igual al número de veces que el índice r aparece en la secuencia $(r_1, r_2, r_3, \dots, r_n)$. En otras palabras, n_r indica cuántas partículas ocupan el estado $|\psi_r\rangle$. Para bosones, n_r puede tomar valores en el rango de $0, 1, 2, \dots, \infty$. Dado que el sistema consta exactamente de N partículas, la suma total de n_r para todos los r debe cumplir la condición $\sum_r n_r = \sum_k n_k = N$.

Otra representación para $|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$ puede expresarse como el producto tensorial de los estados $|n_0\rangle, |n_1\rangle, |n_2\rangle, \dots, |n_\infty\rangle$ es decir:

$$|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+ = |n_0\rangle \otimes |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_\infty\rangle. \quad (4.48)$$

Esta notación se conoce como el producto tensorial de los espacios de Hilbert individuales correspondientes a cada n .

Ahora, la expresión (4.47), o equivalentemente (4.48), muestra que este estado es ortonormal. Es decir, definimos ${}_+\langle n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty|$ de manera que

$${}_+\langle n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+ = \delta_{n'_0 n_0} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty}, \quad (4.49)$$

estos estados forman bases del espacio $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, respectivamente. Para demostrarlo, calculamos el producto escalar entre (4.49), teniendo en cuenta (4.45),

$$\begin{aligned} {}_+\langle n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{n'_0!n'_1!\dots n'_\infty!n_0!n_1!\dots n_\infty!}} \times \\ &\times \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} \langle \varphi_{r_1} | \phi_{\pi(s_1)} \rangle \dots \langle \varphi_{r_n} | \phi_{\pi(s_n)} \rangle. \end{aligned} \quad (4.50)$$

En las secuencias $r_1, r_2, \dots, r_n$, hay n'_r índices iguales a r , y en $s_1, s_2, \dots, s_n$, hay n_r índices iguales a r . Además, en $\pi(s_1), \pi(s_2), \dots, \pi(s_n)$, hay exactamente n_r índices iguales a r . Si

para alguna permutación $\pi \in \mathcal{P}_n$, se cumple $\pi(s_1) = r_1, \dots, \pi(s_n) = r_n$, por defecto, $n'_r = n_r$. En este caso, el término correspondiente a esa permutación es uno. Si, en cambio, para alguna permutación $\pi(s) \neq r$, entonces el término correspondiente a esa permutación es cero, ya que $\langle \varphi_r | \phi_{\pi(s)} \rangle = 0$. Sumando sobre todas las permutaciones, solo contribuyen aquellas que cumplen el primer caso. Dado que en la secuencia $\pi(s_1)\pi(s_2), \dots, \pi(s_1)$ existen r índices que se repiten n_r veces, hay $n_0!n_1! \dots n_\infty!$ contribuciones a la suma total, siendo este el resultado final. Si dividimos esta suma por $\sqrt{n'_0!n'_1! \dots n'_\infty!n_0!n_1! \dots n_\infty!}$, donde $n'_r = n_r$, obtenemos que el producto interno es igual a uno. Además, dado que en cada contribución se cumple $\pi(s_1) = r_1, \dots, \pi(s_n) = r_n$, esto implica que para que se cumpla dicha condición, solo debe existir la igualdad $(r_1, r_2, \dots, r_n) = (s_1, s_2, \dots, s_n)$, y de lo contrario, la suma se anulará.

Para demostrar que los estados $|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+$ forman una base de $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$, se observa que cualquier vector $|\Phi\rangle$ en $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$ puede expresarse como $|\Phi\rangle = |\Psi\rangle_+ = \mathcal{S}_+|\Psi\rangle$, donde $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes n}$. Dado que los kets $|\psi_{r_1}, \psi_{r_2}, \dots, \psi_{r_n}\rangle$ forman una base de $\mathcal{H}^{\otimes n}$, podemos expandir $|\Psi\rangle$ de la siguiente manera:

$$|\Psi\rangle = \sum_{r_1, r_2, \dots, r_n} C_{r_1, r_2, \dots, r_n} |\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle, \quad (4.51)$$

Así, el estado $|\Phi\rangle_+$ se expresa como:

$$|\Phi\rangle_+ = \sum_{r_1, r_2, \dots, r_n} C_{r_1, r_2, \dots, r_n} \mathcal{S}_+ |\psi_{r_1}, \dots, \psi_{r_n}\rangle. \quad (4.52)$$

Considerando la expresión (4.47) y $\{n\} = (n_0, n_1, \dots, n_\alpha, \dots, n_\beta, \dots, n_\gamma, \dots, n_\infty)$ como el número de ocupación de todos los valores de las etiquetas n_k , la expansión (4.52) revela que cualquier estado $|\Phi\rangle_+$ en $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$ se puede expresar como una combinación lineal de los vectores $|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+$:

$$|\Phi\rangle_+ = \sum_{\{n\}} C_{\{n\}} |n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+, \quad (4.53)$$

esto implica que los estados $|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle_+$ forman una base del espacio $\mathcal{H}_+^{\otimes n}$. Con base en esto, obtenemos la relación de completez dada por:

$$\sum_{\{n\}} |n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty| = \hat{\mathcal{I}}. \quad (4.54)$$

A continuación, es esencial introducir un nuevo tipo de operador: los operadores de creación y aniquilación, los cuales desempeñan un papel fundamental en el formalismo de la segunda cuantización. Estos operadores facilitan la expresión conveniente de interacciones que no conservan el número de partículas.

4.1.2. Operadores de creación y aniquilación

El primer paso implica la expansión del espacio de Hilbert para permitir un mayor número posible de partículas, no solo N . Aunque, en realidad, no es necesario realizar esta expansión, ya que el Hamiltoniano conserva el número de partículas, considerar un espacio de Hilbert extendido resulta ser un recurso útil. El operador de creación, denotado como $\hat{a}_k^\dagger$, actúa en algún estado de nuestro espacio de Hilbert extendido, y su efecto es la creación de una partícula en el estado k . Esta acción se expresa mediante la relación:

$$\hat{a}_k^\dagger |n_0, n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_0, n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (4.55)$$

El conjugado hermítico u operador adjunto del operador de creación es $\hat{a}_k = (\hat{a}_k^\dagger)^\dagger$ y se conoce como operador de aniquilación. Este último destruye una partícula en el estado k y se expresa mediante la relación:

$$\hat{a}_k |n_0, n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle = \sqrt{n_k} |n_0, n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (4.56)$$

Para bosones, los operadores de creación y aniquilación satisfacen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= \delta_{k,k'}, \\ [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = 0 \quad \forall k, k'. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Operador número de partícula

Una pregunta fundamental en sistemas de muchos cuerpos es ¿Cuántas partículas ocupan el estado k ? En el contexto cuántico, esperamos que el número de partículas en el estado k esté determinado por el autovalor del operador hermítico $\hat{n}_k$, también conocido como operador de número u operador de ocupación. Este operador $\hat{n}_k$ resulta ser extremadamente útil. Por ejemplo, supongamos que estamos tratando con un sistema de partículas no interactuantes, donde k etiqueta los autoestados de energía para un Hamiltoniano de una sola partícula. En este caso, cada partícula en el estado k tiene una energía ϵ_k , y la energía total de las partículas en el estado k está dada por el operador $\epsilon_k \hat{n}_k$. Por lo tanto, la energía total de las partículas en el sistema se expresa como (Hermele, 2010):

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k. \quad (4.58)$$

Ahora se buscará una fórmula para expresar $\hat{n}_k$ en términos de $\hat{a}_k^\dagger$ y $\hat{a}_k$, siguiendo el caso bosónico.

$$\hat{n}_k = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (4.59)$$

Es evidente que se necesitará un operador cuya acción sobre las funciones de onda proporcione el número total de partículas en el sistema. No se requiere mucha discusión para concluir que dicho operador es

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k = \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k. \quad (4.60)$$

Recordando la ecuación dada en la expresión (4.1), que representa el Hamiltoniano original, en el Formalismo de la Segunda Cuantización se reescribe como:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k}_{=\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4}}_{=\hat{H}_2}. \quad (4.61)$$

Aquí, los operadores $\hat{a}_k^\dagger$ y $\hat{a}_k$, para todo k , actúan en la base de Fock $|n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$. Hemos designado $\hat{H}$ como la suma de dos términos:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2. \quad (4.62)$$

Ahora se demostrará la equivalencia entre el Hamiltoniano original de la expresión (4.1), que implica una suma entre partículas, y el Hamiltoniano (4.61), que considera la suma sobre estados de una sola partícula.

Para ello, se considera la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo asociada al Hamiltoniano (4.61):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \text{ con } |\Psi(0)\rangle \text{ dado.} \quad (4.63)$$

Se propone una representación de $|\Psi(t)\rangle$ como una superposición sobre todos los valores $\{n'\}$, es decir, $|\Psi(t)\rangle$ se expresa como:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty\rangle. \quad (4.64)$$

Sustituyendo la expresión (4.64) en la ecuación de Schrödinger, obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty\rangle = \hat{H} \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) |n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty\rangle. \quad (4.65)$$

Al aplicar el bra representado por $\langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty|$ y haciendo uso de la ortonormalidad (ecuación (4.49)) a ambos lados de la ecuación anterior, esta adquiere la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n'\}}(t) = \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \quad (4.66)$$

haciendo uso de la expresión (4.62) y distribuyendo términos, obtenemos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n'\}}(t) &= \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_1 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\ &+ \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_2 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Abordemos primero el primer término del lado derecho de la ecuación (4.67), el cual se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_1 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \\ &= \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \end{aligned} \quad (4.68)$$

Observemos que los únicos operadores presentes son $\hat{a}_k^\dagger$ y $\hat{a}_k$, lo que nos permite expresar la ecuación de la siguiente manera:

$$\sum_{\{n'\}} \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k}_{=n_k} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \quad (4.69)$$

Utilizando la expresión (4.59), que representa el operador número de partículas en el estado k con la propiedad $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k | n_k \rangle = n_k | n_k \rangle$, se tiene

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \\ &= \sum_{\{n'\}} \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k \delta_{n'_0 n_0} \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t), \\ &= \sum_{\{n'\}} \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k \delta_{\{n\} \{n'\}} C_{\{n'\}}(t), \end{aligned} \quad (4.70)$$

demostrando que este estado es ortonormal según (4.49), al aplicar la expresión y la restricción de la suma $\sum_{\{n'\}}$ para cada delta de Kronecker, se obtiene:

$$\sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k C_{\{n\}}(t). \quad (4.71)$$

Ahora, al sustituir el resultado obtenido (4.71) en la expresión original (4.67),

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) &= \underbrace{\sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_1 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t)}_{= C_{\{n\}}(t) \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k} \\
&+ \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_2 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned} \tag{4.72}$$

obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) = C_{\{n\}}(t) \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_2 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \tag{4.73}$$

En segundo lugar, analizaremos el segundo término del lado derecho de la expresión (4.73), considerando $\hat{H}_2$, el cual se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_2 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \\
&= \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
&\times C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned} \tag{4.74}$$

De manera análoga al caso de la Primera Cuantización, se pueden identificar ocho casos distintos de interacción, que se expresan como:

$$\left. \begin{aligned} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle &= \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle &= \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle &= \\ \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle &= \end{aligned} \right\} \equiv V_1, \tag{4.75}$$

$$\left. \begin{aligned} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle &= \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle &= \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle &= \\ \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle &= \end{aligned} \right\} \equiv V_2. \tag{4.76}$$

Esto permite expresar la ecuación (4.74) como la suma de dos términos distintos,

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) = V'_1 + V'_2. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Tomando por separado los casos correspondientes a V_1 y V_2 :

Para V_1 de (4.75) se obtiene:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \equiv V'_1, \end{aligned} \quad (4.78)$$

Para V_2 de (4.76) se obtiene:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \\ & + \sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ & \times C_{\{n'\}}(t) \equiv V'_2. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Se puede observar que tanto en las ecuaciones (4.78) como (4.79), los únicos operadores presentes dentro de los diferentes “sándwich” son los distintos operadores de creación $\hat{a}_k^\dagger$ y aniquilación $\hat{a}_k$. La otra parte es un número complejo y puede salir de la expresión, lo que nos lleva a la siguiente forma:

para los casos de V_1

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \equiv V'_1,
\end{aligned} \tag{4.80}$$

y para los casos de V_2 tendremos

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1} \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\
& \times C_{\{n'\}}(t) \equiv V'_2.
\end{aligned} \tag{4.81}$$

Es relevante señalar que, en este contexto, el término “sándwich” se refiere al valor esperado

de la acción de los operadores de creación y aniquilación en un estado particular sobre otro estado específico en la base de Fock. Considerando el primer término correspondiente a la ecuación (4.80), definido como V_1' ; se procede de la siguiente manera:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle \times \\ \times C_{\{n'\}}(t). \quad (4.82)$$

En este análisis, se empleará la acción de cada uno de los operadores de aniquilación y creación en los diferentes “sándwich”. Por lo tanto, utilizando las definiciones (4.55) y (4.56), se tiene:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times \\ \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \underbrace{(\hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty)}_{=\sqrt{n'_{k_4}} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty} \rangle C_{\{n'\}}(t). \quad (4.83)$$

Es decir, al aplicar el primer operador sobre el ket, en cada uno de los términos aparece un coeficiente que involucra la raíz cuadrada de un número complejo, el cual puede salir del “sándwich” sin problema. Esto conduce a:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times \\ \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \quad (4.84)$$

Análogamente aplicamos el siguiente operador a los diferentes kets,

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times \\ \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, \dots, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, \dots, n'_{k_3}-1, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty} \rangle C_{\{n'\}}(t), \quad (4.85)$$

por consiguiente, nuevamente surge un término que puede factorizarse en cada uno de los “sándwiches”, lo que nos lleva a:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t). \quad (4.86)$$

Se observa que los dos últimos operadores que faltan por actuar sobre los diferentes kets son $\hat{a}_{k_2}^\dagger$ y $\hat{a}_{k_1}^\dagger$, respectivamente. Al aplicar $\hat{a}_{k_2}^\dagger$, el proceso sigue de manera similar, produciendo términos donde los coeficientes pueden salir del “sándwich” sin dificultad.

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{\left(\hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle \right)}_{= \sqrt{n'_{k_2} + 1} | n'_0, \dots, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle} C_{\{n'\}}(t), \quad (4.87)$$

donde $\sqrt{n'_{k_2} + 1}$ es un coeficiente que puede salir de los diferentes “sándwiches”, resultando en:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \quad (4.88)$$

y al operar $\hat{a}_{k_1}^\dagger$,

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \quad (4.89)$$

$$= \sqrt{n'_{k_1} + 1} | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle$$

donde aparece un término de raíz cuadrada que puede salir de cada “sándwich”, lo que resulta en lo siguiente:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \quad (4.90)$$

dado que este estado es ortonormal (según la ecuación (4.49)), la expresión anterior adquiere la siguiente forma:

$$\sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sqrt{n'_{k_4} n'_{k_3} (n'_{k_2} + 1) (n'_{k_1} + 1)} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times$$

$$\times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} + 1 n_{k_1}} \delta_{n'_{k_2} + 1 n_{k_2}} \delta_{n'_{k_3} - 1 n_{k_3}} \delta_{n'_{k_4} - 1 n_{k_4}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t). \quad (4.91)$$

Así, la suma $\sum_{n'}$ se restringirá en cada término por los deltas de Kronecker, lo que resulta en:

$$\frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \quad (4.92)$$

La expresión obtenida sigue la misma estructura que el cálculo del primer término de V'_1 de primera cuantización (4.30). Por lo tanto, al realizar el tratamiento de segunda cuantización y aplicar los operadores de creación y aniquilación para calcular los diferentes términos de V'_1 (consultar el anexo (C.1)) y V'_2 (consultar el anexo (C.1)), se obtienen las mismas ecuaciones correspondientes a V'_1 y V'_2 (consultar la expresión (C.306) y la expresión (C.307)) en relación con la primera cuantización.

Ahora, la ecuación (4.73), teniendo en cuenta las expresiones (4.77), adquiere la siguiente forma:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) = C_{\{n\}}(t) \sum_k \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k + \underbrace{\sum_{\{n'\}} \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{H}_2 | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle}_{=V'_1 + V'_2} C_{\{n'\}}(t).$$

Por tanto, obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{\{n\}}(t) = C_{\{n\}}(t) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} n_k + V_1' + V_2', \quad (4.93)$$

donde V_1' y V_2' se definen por las expresiones (C.306) y (C.307), respectivamente. Se observa que el tratamiento de la Segunda Cuantización conduce exactamente a la misma ecuación para los coeficientes que el enfoque de la Primera Cuantización (4.33). Por lo tanto, al trabajar con el Hamiltoniano (4.61), la ecuación de Schrödinger en el marco de la Segunda Cuantización es, simbólicamente, la misma ecuación, pero ahora todo ocurre en el espacio de Fock.

El Hamiltoniano (4.61) se puede expresar de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l, \quad (4.94)$$

donde, los operadores $\hat{b}^\dagger$ y $\hat{b}$ representan el operador de creación y el operador de destrucción, respectivamente. Estos operadores desempeñan un papel crucial en la descripción de sistemas cuánticos y se denotan como b debido a que actúan sobre partículas con espín entero llamadas bosones; Las que se consideran en este trabajo. Estos operadores se aplican a partículas que se caracterizan por su conjunto de números cuánticos, que pueden incluir parámetros como el número principal (n), el momento angular orbital (l), la proyección del momento angular (m) y el espín (s). Donde $|i\rangle$ representa una partícula con número cuántico i , que puede expresarse como $|n, l, m, s\rangle$ en algunos casos. El número cuántico i se usará solo para la base de Fock en determinadas ocasiones.

Considerando ahora que $|i\rangle$ y $|j\rangle$ son autovectores del Hamiltoniano de una sola partícula, este último se define como $\hat{H}_0$.

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (4.95)$$

con $\hat{\mathbf{P}}$ como el operador del momento lineal y $\hat{V}_{ext}(\hat{\mathbf{r}})$ como un potencial externo, cuya discusión se reserva para más adelante, se procede a obtener lo siguiente:

$$\begin{aligned}\langle i | \hat{H}_0 | j \rangle &= \langle i | E_j | j \rangle, \\ &= E_j \delta_{ij},\end{aligned}\tag{4.96}$$

recordando que la base de Fock debe ser ortonormal, se cumple con la siguiente relación:

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}.\tag{4.97}$$

Al reescribir la ecuación (4.94), se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger E_j \delta_{ij} \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l \\ &= \sum_i \hat{b}_i^\dagger E_i \hat{b}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l,\end{aligned}$$

es decir, toma la forma,

$$\hat{H} = \sum_i \hat{b}_i^\dagger E_i \hat{b}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l.\tag{4.98}$$

En esta expresión, el $\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l$ corresponde a la parte de interacción. Según la definición del operador de número (4.59), este satisface la ecuación de autovalores $\hat{N}|n\rangle = \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$, lo que implica que los estados $|n\rangle$ de la base de Fock son autoestados del operador de número. Por lo tanto, la ecuación (4.98) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_i \hat{b}_i^\dagger E_i \hat{b}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l \\ &= \sum_i E_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l \\ &= \sum_i E_i \underbrace{\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i}_{=\hat{n}_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l \\ \hat{H} &= \sum_i E_i \hat{n}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l.\end{aligned}$$

Esto sugiere que:

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{n}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l.$$

Por lo tanto, si hay n partículas que no interactúan entre sí, inmersas en un potencial externo $\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\hat{x})$, se describen mediante esta primera parte:

$$\hat{H}|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = \sum_i E_i \hat{n}_i |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = \sum_i E_i n_i = E_1 n_1 + E_2 n_2 + E_3 n_3 \dots \quad (4.99)$$

En el término $\sum_i E_i n_i$ se representa la energía total del sistema. Al examinar la ecuación (4.94), en su primera parte, se observa que es la energía en el estado i multiplicada por el número de partículas en dicho estado. Para analizar el segundo término de la ecuación, se nota que implica la aniquilación de dos partículas en los estados k y l mediante los operadores $\hat{b}_k, \hat{b}_l$, y simultáneamente la creación de dos nuevas partículas en los estados i y j a través de $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger$. La probabilidad asociada a este proceso está mediada por el término $\langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle$. Es importante destacar que los autovectores del Hamiltoniano $\hat{H}_0$ no necesariamente son autovectores del operador $\hat{V}$.

Dentro del marco de Segunda Cuantización, se procederá a explorar la creación y aniquilación de partículas mediante combinaciones lineales de operadores, junto con las funciones de onda de una sola partícula que evolucionan en el tiempo.

4.1.3. Operadores de campo de creación y aniquilación

Los operadores de campo de creación y aniquilación se definen mediante:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i^\dagger, \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i, \end{aligned} \quad (4.100)$$

donde $\psi_i(\mathbf{r}, t)$ y $\psi_i^*(\mathbf{r}, t)$ representan las funciones de onda de una sola partícula, las cuales son autofunciones del Hamiltoniano $\hat{H}_0$ (4.95). Los operadores de campo de creación $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t)$ y de aniquilación $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ satisfacen la siguiente relación de conmutación:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\
&= \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i \sum_{i'} \psi_{i'}^*(\mathbf{r}', t) \hat{b}_{i'}^\dagger - \sum_{i'} \psi_{i'}^*(\mathbf{r}', t) \hat{b}_{i'}^\dagger \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i, \\
&= \sum_i \sum_{i'} \psi_i(\mathbf{r}, t) \psi_{i'}^*(\mathbf{r}', t) \underbrace{\left(\hat{b}_i \hat{b}_{i'}^\dagger - \hat{b}_{i'}^\dagger \hat{b}_i \right)}_{=[\hat{b}_i, \hat{b}_{i'}^\dagger]}, \\
&= \sum_i \sum_{i'} \psi_i(\mathbf{r}, t) \psi_{i'}^*(\mathbf{r}', t) \underbrace{\left[\hat{b}_i, \hat{b}_{i'}^\dagger \right]}_{=\delta_{i,i'}} = \sum_i \sum_{i'} \psi_i(\mathbf{r}, t) \psi_{i'}^*(\mathbf{r}', t) \delta_{i,i'}, \\
&= \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, t) \psi_i^*(\mathbf{r}', t) = \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).
\end{aligned}$$

Para llegar a este resultado, se emplearon las relaciones de conmutación de los operadores de creación y aniquilación (4.95), junto con la relación de completitud de las funciones de onda.

Es decir, los operadores de campo satisfacen la relación:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] = \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (4.101)$$

y de manera análoga satisfacen la relación,

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right] = 0 = \left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right]. \quad (4.102)$$

Considerando la ecuación (4.95), la amplitud de probabilidad asociada a este proceso, caracterizada por el término de interacción $V_{i,j,k,l} = \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle$, se expresa como:

$$V_{i,j,k,l} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \psi_j^*(\mathbf{r}', t) \hat{V}(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|) \psi_k(\mathbf{r}, t) \psi_l(\mathbf{r}', t), \quad (4.103)$$

así, el Hamiltoniano (4.94) adquiere la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \int d^3\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \psi_j(\mathbf{r}, t) \hat{b}_j \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \psi_j^*(\mathbf{r}', t) \hat{V}(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|) \psi_k(\mathbf{r}, t) \psi_l(\mathbf{r}', t) \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_l,
\end{aligned} \quad (4.104)$$

Al expresar el Hamiltoniano (4.104) en términos de los operadores de campo de creación y aniquilación (4.100), este adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{V}(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t),\end{aligned}\quad (4.105)$$

Para calcular la amplitud (4.103), se necesita información sobre el potencial de interacción $\hat{V}(|\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|)$. Se supone que este potencial depende únicamente de la distancia entre las partículas de igual masa y no del tiempo, y se analizará en la siguiente sección.

4.2. Interacciones efectivas y longitud de dispersión

Para continuar con el análisis, es necesario comprender el potencial $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. En esta sección, se presentarán algunas aproximaciones para deducir su expresión. Se considera la dispersión de dos partículas de masa m_1 y m_2 , asumiendo inicialmente que no poseen grados de libertad internos. El Hamiltoniano para dos partículas interactuantes se expresa como:

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

Donde se considera la energía cinética de cada partícula y la energía de interacción entre ambas. Se procede a transformar al sistema de centro de masa y coordenadas relativas. El Hamiltoniano de interés es aquel correspondiente a la coordenada relativa $\hat{r} = |\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}'|$ con una masa igual a la masa reducida $m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ de las dos partículas:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m_r} + \hat{V}(\hat{r}). \quad (4.106)$$

La función de onda para el movimiento del centro de masa representa una onda plana, mientras que la función de onda del movimiento relativo satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \psi + V(\hat{r}) \psi = E \psi,$$

con una masa igual a la masa reducida $m_r = \frac{m}{2}$ de las dos partículas, debido a que se comienza a trabajar con partículas idénticas. Además, el potencial tiene un alcance finito b ,

es decir, si $r \gg b$, entonces $V(r) = 0$. Para describir la dispersión, la función de onda para el movimiento relativo se expresa como la suma de una onda plana incidente y una onda dispersa. La función de onda en el espacio de coordenadas viene dada por

$$\psi = e^{ikz} + \psi_{sc}(\mathbf{r}). \quad (4.107)$$

En esta parte, ψ representa la función de onda para el movimiento relativo y se formula como la combinación de una onda plana incidente e^{ikz} y una onda dispersa $\psi_{sc}(\mathbf{r})$. En este contexto, se emplean estados de onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ junto con un factor explícito $\frac{1}{\sqrt{V}}$. Además, en este tratamiento, se ha decidido que la velocidad relativa de la onda incidente sea en la dirección z .

En separaciones interatómicas grandes, la onda dispersada se describe como una onda esférica saliente, expresada por la función $f(\mathbf{k}) = e^{ikr}/r$, donde $f(\mathbf{k})$ representa la amplitud de dispersión y k especifica el vector de onda de la onda dispersada. Se supone que la interacción entre átomos es esféricamente simétrica, y que la amplitud de dispersión $f(\theta)$ depende únicamente de la dirección a través del ángulo de dispersión θ , que es el ángulo entre las direcciones del momento relativo de los átomos antes y después de la dispersión. La función de onda para r grande es, por lo tanto,

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta)e^{ikr}/r. \quad (4.108)$$

Es posible desarrollar e^{ikz} en polinomios de Legendre, dado que en coordenadas esféricas,

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta},$$

$$e^{ikz} = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\cos \theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos \theta). \quad (4.109)$$

Además, se propone la función $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} D_l P_l(\cos \theta)$, por lo tanto, se puede reescribir (4.107) y (4.108) como:

$$\psi(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} \left[(-i)^l + \frac{D_r}{r} \right] P_l(\cos \theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos \theta), \quad (4.110)$$

Manteniendo la condición de que la onda incidente tiene dirección z , la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el Hamiltoniano (4.106) en coordenadas esféricas puede ser expresada como:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos \theta), \quad (4.111)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r). \quad (4.112)$$

En la región donde r es considerablemente mayor que b , se establece que $V(r) = 0$, entonces, la energía E se describe como la suma de dos términos: $\frac{\hbar^2 k^2}{m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2}$ y la solución a esta ecuación se encuentra determinada por:

$$R_{kl}(r) = \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)}{kl}, \quad (4.113)$$

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

$$\psi(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (-i)^l e^{i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos \theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (i)^l e^{-i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos \theta), \quad (4.114)$$

igualando las ecuaciones (4.110) y (4.114) se obtiene,

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos \theta), \quad (4.115)$$

ahora, al analizar la ecuación (4.112) para $R(r)$, en referencia a la mecánica clásica, se presenta un potencial efectivo $V_{\text{ef}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)$, tanto para $l = 0$ como para $l \neq 0$. Así,

si una partícula lleva una energía menor que la barrera, esta no será afectada por el potencial $V(r)$, lo que implica que solo las ondas con $l = 0$ serán dispersadas por el potencial $V(r)$. Este fenómeno se debe a que,

$$f(\theta) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin \delta_0, \quad (4.116)$$

y la función de onda dispersa será:

$$\psi_{sc}(r, \theta) = \frac{\sin \delta_0}{kr} e^{i(kr + \delta_0)}, \quad (4.117)$$

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

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan(\delta_0)}{k} = -a. \quad (4.118)$$

Para continuar, se toma el límite cuando $k \rightarrow 0$, lo que implica que $|ka| \ll 1$, $\delta_0 \approx ka$ y $\sin(\delta_0) \approx ka$. Por consiguiente, la ecuación (4.117) se puede expresar como:

$$\psi_{sc}(r, \theta) = -\frac{a}{r} e^{ik(r+a)}. \quad (4.119)$$

Recordando que el objetivo inicial es encontrar una expresión para el potencial

$$V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

Se considera la relación entre la función $F(\mathbf{r})$ y su transformada de Fourier $F(\mathbf{q})$,

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} F(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} F(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.120)$$

la transformada de Fourier de ψ se define como:

$$\psi(\mathbf{k}') = \int d^3\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.121)$$

por tanto, la función de onda en el espacio de coordenadas (4.107) en la representación del momento se escribirá como:

$$\psi(\mathbf{k}') = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \psi_{sc}(\mathbf{k}'), \quad (4.122)$$

en este resultado, la contribución de la onda plana e^{ikz} en el espacio de coordenadas se ha convertido en la delta de Dirac tridimensional en el espacio de momentos. La segunda parte de la integral representa la contribución de la función de onda dispersa $\psi_{sc}(\mathbf{r})$. La función de onda (4.122) satisface la ecuación de Schrödinger, que es

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} \right) \psi_{sc}(\mathbf{k}') = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \psi_{sc}(\mathbf{k}''), \quad (4.123)$$

donde $(\frac{\hbar^2 k^2}{m}) = E$ representa el valor propio de energía, y $U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') = U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'')$ es la transformada de Fourier de la interacción átomo-átomo. La onda dispersada se expresa entonces como

$$\psi_{sc}(\mathbf{k}') = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} + i\delta \right)^{-1} \left(U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \psi_{sc}(\mathbf{k}'') \right), \quad (4.124)$$

Se ha introducido de manera estándar la parte imaginaria infinitesimal δ para asegurar que solo las ondas salientes estén presentes en la onda dispersa. Esta ecuación se puede expresar de la siguiente forma:

$$\psi_{sc}(\mathbf{k}') = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \hbar^2 k^2/m), \quad (4.125)$$

donde la matriz de dispersión T satisface la llamada ecuación de Lippmann-Schwinger

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \left(E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E). \quad (4.126)$$

La onda dispersada a grandes distancias y para energía cero ($E = k = 0$) puede calcularse a partir de la ecuación (4.125), empleando la transformada de Fourier

$$\int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}}{k'^2} = \frac{1}{4\pi r}, \quad (4.127)$$

encontramos

$$\psi_{sc}(r) = -\frac{mT(0, 0; 0)}{4\pi\hbar^2 r}. \quad (4.128)$$

Se ha sustituido el argumento k' en la matriz T por cero, dado que los valores significativos en la transformada de Fourier son del orden de $1/r$. Por lo tanto, la expresión (4.128) se puede identificar con $\psi = 1 - \frac{a}{r}$, La constante a se llama longitud de dispersión. Da la intersección de la función de onda asintótica en el eje r . lo que implica que la matriz de dispersión a energía cero y la longitud de dispersión están relacionadas mediante la expresión

$$a = \frac{m}{4\pi\hbar^2} T(0, 0; 0) \quad (4.129)$$

o

$$T(0, 0; 0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (4.130)$$

De manera más general, la amplitud de dispersión y la matriz T están relacionadas por la ecuación

$$F(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}). \quad (4.131)$$

En la aproximación de Born, que se obtiene al considerar solo el primer término del lado derecho de la ecuación de Lippmann-Schwinger, la longitud de dispersión se expresa mediante la siguiente ecuación.

$$a_{Born} = \frac{m}{4\pi\hbar^2} U(0) = \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}), \quad (4.132)$$

correspondiente a $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 0$. Así, la matriz de dispersión, T , puede considerarse como una interacción efectiva en el sentido de que, cuando se inserta en la expresión de aproximación de Born para la función de onda dispersa, produce el resultado exacto cuando los átomos están separados por distancias grandes. Todos los efectos de los componentes de longitud de onda corta de la función de onda, que reflejan las correlaciones entre las dos partículas, se han tenido en cuenta implícitamente al reemplazar $U(0)$ por T .

Para obtener más información sobre las interacciones efectivas, se adopta otro enfoque. Se dividen los estados intermedios en la ecuación de Lippmann-Schwinger en dos grupos: aquellos con energía mayor que algún valor de corte $\epsilon_c = \frac{\hbar^2 k_c^2}{m}$, y aquellos con menor energía. La suma de estados intermedios en (4.126) se realiza en dos etapas. Primero se suman todos los estados intermedios con energía superior a ϵ_c , y luego se suman los estados restantes. La primera etapa conduce a una cantidad $\tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E)$ que satisface la ecuación

$$\tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = U(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'', k'' > k_c} U(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') \left(E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} \tilde{U}(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E), \quad (4.133)$$

y la segunda etapa construye las correlaciones asociadas con estados de menor energía:

$$T(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) = \tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'', k'' < k_c} \tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}''; E) \left(E - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} + i\delta \right)^{-1} T(\mathbf{k}'', \mathbf{k}; E). \quad (4.134)$$

La última ecuación muestra que al utilizar $\tilde{U}$ como interacción en un problema de dispersión, donde los estados intermedios con energías superiores a ϵ_c no aparecen explícitamente, se obtiene la matriz de dispersión correcta. En este contexto, actúa como una interacción efectiva que describe las interacciones entre un conjunto limitado de estados. La discrepancia entre la interacción efectiva y la interacción simple se atribuye a la influencia de los estados de alto momento. Es importante destacar que el potencial efectivo depende explícitamente de la elección de la energía ϵ_c . Sin embargo, el resultado final para la amplitud de dispersión es independiente de esta elección.

Si se toma el límite $k_c \rightarrow 0$, la interacción efectiva se reduce a la matriz de dispersión. Cuando k_c es pequeño, es decir, para describir interacciones entre excitaciones de longitud de onda muy larga y a bajas energías, la interacción efectiva se simplifica a

$$\tilde{U}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; E)|_{k_c \rightarrow 0} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \equiv U_0. \quad (4.135)$$

Para calcular las propiedades de los gases diluidos, la clave reside en que la interacción efectiva puede emplearse para realizar cálculos precisos en sistemas diluidos sin necesidad de calcular correlaciones de corto alcance. Esto implica que la aproximación de Born para la dispersión y enfoques de campo medio como Hartree o Hartree-Fock para calcular energías producen resultados correctos siempre que se utilice la interacción efectiva en lugar de la simple (Pethick y Smith, 2008).

Desde la ecuación (4.134) para la matriz de dispersión, se puede hacer la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} T(0, 0; 0) &\approx \tilde{U}(0), \\ \tilde{U}(0) &= \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \end{aligned} \quad (4.136)$$

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

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\mathbf{r}). \quad (4.137)$$

Esta ecuación es esencial para abordar la descripción de un condensado de Bose con interacciones. En particular, este trabajo se centra en el estudio de un gas de Bose en dos estados hiperfinos y las posibles fases que surgen cuando se confina en un potencial externo específico.

En resumen, en este capítulo se abordó el Formalismo de la Segunda Cuantización, realizando un tratamiento que revela la equivalencia entre la ecuación (4.33), también conocida como la ecuación de Schrödinger para coeficientes o tratamiento de **Primera Cuantización**, y la

ecuación de Schrödinger para coeficientes desde la perspectiva de la **Segunda Cuantización**. Se introdujo el espacio de Fock, los operadores de creación y aniquilación, así como los operadores de campo asociados, lo que permitió expresar el Hamiltoniano de muchas partículas en términos de estos operadores de campo (4.105).

Es fundamental destacar que el formalismo conocido como la **Segunda Cuantización** no introduce nuevos principios físicos ni una teoría que difiera de la mecánica cuántica convencional. La cuantificación realizada se limita a considerar las partículas como objetos cuánticos, manteniendo así el marco conceptual en línea con la mecánica cuántica estándar.

Adicionalmente, se abordó un tratamiento de dispersión a bajas energías, donde se supuso que el potencial $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ depende únicamente de la distancia entre partículas de igual masa y no del tiempo. Este enfoque condujo a la ecuación de Gross-Pitaevskii, que describe la dinámica de un condensado con interacciones a temperatura $T = 0$, y será examinada en detalle en el próximo capítulo.

Capítulo 5

Ecuación de Gross-Pitaevskii

5.1. Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii escalar

Se parte primero del Hamiltoniano en segunda cuantización expresado por la ecuación (4.105),

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{V}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t),\end{aligned}\tag{5.138}$$

el potencial de interacción, $\hat{V}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$, es modelado mediante choques entre pares de partículas, es decir, la representación del potencial de interacción en la base de las coordenadas se expresa como $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = g\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$, donde $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$, siendo $\hbar$ la constante de Planck y a la longitud de dispersión de onda $s = a$ y la delta de Dirac en tres dimensiones bajo el sistema de coordenadas cartesianas es $\delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \equiv \delta(|x - x'|)\delta(|y - y'|)\delta(|z - z'|)$. Al reescribir la ecuación anterior, se tiene:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \underbrace{\int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}_{=\hat{H}_1} \\ & + \underbrace{\frac{g}{2} \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}_{=\hat{H}_2},\end{aligned}\tag{5.139}$$

donde se ha denominado $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Con este Hamiltoniano se calcula la ecuación de Heisenberg, que describe la evolución temporal de un operador. En este caso, se calcula para el operador de campo $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$;

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}],\tag{5.140}$$

es decir, lo que se quiere calcular es el siguiente conmutador:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H} \right] = \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] + \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right]. \quad (5.141)$$

Ahora, teniendo en cuenta las relaciones de conmutación de los operadores de campo, las cuales son las siguientes:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] = \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (5.142)$$

al despejar el término $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, se obtiene:

$$\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (5.143)$$

Lo siguiente es calcular el primer término de la ecuación (5.141) utilizando la ecuación (5.143), es decir, calcular el conmutador:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \hat{H}_1 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \int d^3 \mathbf{r}' \left(\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \int d^3 \mathbf{r}' \left(\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) - \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \right) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) + \int d^3 \mathbf{r}' \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ &= \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1 - \underbrace{\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t)}_{=\hat{H}_1} + \int d^3 \mathbf{r}' \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ &= \cancel{\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1} - \cancel{\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_1} + \int d^3 \mathbf{r}' \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ &= \int d^3 \mathbf{r}' \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t), \\ \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

entonces, el primer conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] = \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (5.144)$$

Ahora se calculará el segundo término de la ecuación (5.141), teniendo en cuenta también la ecuación (5.143). Es decir, se calculará el conmutador:

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

entonces, el segundo conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] = g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (5.145)$$

Una vez calculados los conmutadores (5.144) y (5.145), se procede a sustituir los resultados en la ecuación de Heisenberg (5.140), la cual queda de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] , \\
 &= [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1] + [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2] , \\
 &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\
 &= \left(\hat{H}_0 + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t),
 \end{aligned}$$

lo que resulta es:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \quad (5.146)$$

Si se desea describir un gas a $T = 0$, se sabe que a esta temperatura las partículas del gas pasan a ocupar el estado base de una partícula. En consecuencia, los operadores de campo pueden ser sustituidos por el primer término de la suma;

$$\begin{aligned}
 \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i^\dagger \approx \psi_0^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0^\dagger, \\
 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \psi_i(\mathbf{r}, t) \hat{b}_i \approx \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0,
 \end{aligned} \quad (5.147)$$

sustituyendo lo anterior en la ecuación (5.146), se obtiene:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \left(\hat{H}_0 + g \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \\
 i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0}{\partial t} &= \left(H_0 + g \psi_0^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0^\dagger \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0 \right) \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0, \\
 i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0}{\partial t} &= \left(\hat{H}_0 + g \underbrace{\psi_0^*(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t)}_{=|\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2} \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 \right) \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0, \\
 i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0}{\partial t} &= \left(\hat{H}_0 + g |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \underbrace{\hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0}_{=\hat{N}_0} \right) \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0, \\
 i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0}{\partial t} &= \left(\hat{H}_0 + g |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \hat{N}_0 \right) \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0,
 \end{aligned}$$

es decir, se reduce a lo siguiente:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \hat{N}_0 \right] \psi_0(\mathbf{r}, t) \hat{b}_0. \quad (5.148)$$

En el límite termodinámico; $\hat{b}_0^\dagger |N_0\rangle \approx \hat{b}_0 |N_0\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle$, conduce a la siguiente ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 N \right] \psi_0(\mathbf{r}, t). \quad (5.149)$$

Ahora, al reemplazar $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ por $\psi(\mathbf{r}, t)$, se obtiene:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 N \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.150)$$

La expresión anterior es la ecuación de Gross-Pitaevskii, la cual describe un condensado de Bose-Einstein con interacciones a temperatura cero.

Ahora, se procederá a describir el tratamiento que tiene en cuenta el espín de las partículas en el sistema. Por lo tanto, el Hamiltoniano, como se muestra en la ecuación (5.138), sufrirá modificaciones y, en consecuencia, también lo hará la ecuación de Gross-Pitaevskii (5.150). A continuación, se abordará este tratamiento correspondiente.

5.2. Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii espinorial

Se parte del Hamiltoniano en términos de los operadores de aniquilación y creación, el cual se expresa de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l, \quad (5.151)$$

Los componentes de este Hamiltoniano pueden conceptualizarse de la siguiente manera: el primer término representa la energía asociada a partículas en un estado libre, mientras que el segundo término corresponde a la energía resultante de la interacción entre partículas. Esta

interacción puede entenderse como el proceso mediante el cual dos partículas, inicialmente en estados k y l , experimentan una dispersión que las lleva a ocupar los estados i y j , respectivamente, bajo la influencia del potencial V .

Además de encontrarse en el estado i , se considera que la partícula tiene una proyección de espín α . Asimismo, junto con la ocupación del estado j , la partícula presenta una proyección de espín β . De esta manera, el Hamiltoniano se expresará de la siguiente forma:

$$\sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \hat{b}_{i,\alpha}^\dagger \langle i\alpha | \hat{H}_0 | j\beta \rangle \hat{b}_{j,\beta}, \quad (5.152)$$

donde $\hat{b}_{i,\alpha}^\dagger$ y $\hat{b}_{j,\beta}$ representan, respectivamente, el operador de creación con proyección de espín α y el operador de destrucción con proyección de espín β . Aquí, $|j\beta\rangle$ denota el estado de una partícula j con proyección β , mientras que $|i\alpha\rangle$ representa el estado de una partícula i con proyección de espín α . Este, en términos de los operadores de campo, será:

$$\sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \quad (5.153)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger, \\ \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}, \end{aligned} \quad (5.154)$$

siendo $\phi_{k,\alpha}$ los autoestados de $\hat{H}_0$. Estos operadores tienen las siguientes relaciones de conmutación,

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}', t)] &= 0, \\ [\hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= 0, \\ [\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t)] &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\alpha,\beta}, \end{aligned} \quad (5.155)$$

Ahora se abordará el término de interacción atómica, es decir, el segundo término del Hamiltoniano expresado en la ecuación (5.151). Dado que se están considerando partículas con

espín distinto de cero, es necesario ajustar el término de interacción. Para ello, se toman dos partículas con espines $F_1 = 1$ y $F_2 = 1$. Utilizando la teoría del momento angular, se sabe que $\hat{\mathbb{F}} = \hat{F}_1 \oplus \hat{F}_2$. Por lo tanto, se puede analizar el sistema en cualquiera de las siguientes bases: $|\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle$ o $|F_1, F_2; m_1, m_2\rangle = |F_1, m_1\rangle \otimes |F_2, m_2\rangle$. Considerando que $\mathbb{F} = 0, \pm 1, \pm 2$, se obtienen los estados $|\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle = \{|2, 2\rangle, |2, 1\rangle, |2, 0\rangle, |2, -1\rangle, |2, -2\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle\}$, los cuales se expresan en términos de la base con los coeficientes de Clebsch-Gordan,

$$\begin{aligned}
|2, 2\rangle &= |1; 1\rangle, \\
|2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle + |0; 1\rangle), \\
|2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|1; -1\rangle + 2|0; 0\rangle + |-1; 1\rangle), \\
|2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\
|2, -2\rangle &= |-1; -1\rangle, \\
|1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle - |0; 1\rangle), \\
|1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; -1\rangle - |-1; 1\rangle), \\
|1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\
|0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|1; -1\rangle + |0; 0\rangle + |-1; 1\rangle),
\end{aligned} \tag{5.156}$$

Se evidencia que los estados $|1, m_{\mathbb{F}}\rangle$ son antisimétricos. Dado que se está tratando con partículas bosónicas, se optará por no considerar estos estados. Ahora, en relación a la interacción, se toma el Hamiltoniano de segunda cuantización ecuación (5.151),

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | \hat{V} | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l, \tag{5.157}$$

donde i, j, k y l representan cada uno un conjunto de números cuánticos asociados a un estado individual de partícula. Al introducir el espín, el conjunto de números cuánticos i incorpora este nuevo parámetro. Para mayor claridad, se expresará explícitamente el valor del espín. Así, el término de interacción es dado por:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \sum_{i, j, k, l} \hat{b}_{i, \alpha}^\dagger \hat{b}_{j, \beta}^\dagger \langle i \alpha, j \beta | \hat{V} | k \gamma, l \sigma \rangle \hat{b}_{k, \gamma} \hat{b}_{l, \sigma}, \quad (5.158)$$

en términos de operadores de campo, esto se expresa como:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int dr \int dr' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{V}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t). \quad (5.159)$$

Usando la aproximación del potencial a bajas energías, se tiene:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} g_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \quad (5.160)$$

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

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{m_{\mathbb{F}}=-\mathbb{F}}^{\mathbb{F}} \int d^3r \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \alpha; \beta | \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t) \sum_{\gamma, \sigma=-F}^F \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} | \gamma; \sigma \rangle \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \quad (5.161)$$

en otras palabras, se pasa de considerar las dos partículas de manera individual a tratarlas como un sistema de dos partículas con un espín total $\mathbb{F} = 0; \pm 2$. Los operadores de creación y aniquilación para pares de partículas con un espín total $\mathbb{F}$ y proyección $m_{\mathbb{F}}$ son:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}}^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \alpha; \beta | \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t), \\ \hat{\Psi}_{\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} | \alpha; \beta \rangle \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (5.162)$$

La expresión (5.161) puede reescribirse de forma más simplificada como:

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \quad (5.163)$$

donde $\hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} = \langle \alpha; \beta | \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} \rangle \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}} | \alpha; \beta \rangle$ representa el elemento de matriz del proyector $\hat{P}_{\mathbb{F}}$ en la base $|F_1, F_2; m_1, m_2\rangle$. Entonces, si se considera el espín total de los átomos en el Hamiltoniano,

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) + \frac{g}{2} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (5.164)$$

se convierte en:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \underbrace{\sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t)}_{\hat{H}_1} \\ & + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, t)}_{\hat{H}_2}, \end{aligned} \quad (5.165)$$

donde se ha denominado $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Ahora, con este Hamiltoniano se calcula la ecuación de Heisenberg, que en este caso se calcula para el operador de campo $\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}], \quad (5.166)$$

es decir, lo que se quiere calcular es el siguiente conmutador.

$$[\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] = [\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1] + [\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2]. \quad (5.167)$$

Ahora, teniendo en cuenta la relacion de conmutación de los operadores de campo,

$$[\hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t)] = \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)_{\nu, \alpha} = \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) - \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t). \quad (5.168)$$

el cual, al despejar el término $\hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t)$, se obtiene lo siguiente:

$$\hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) = \hat{\Psi}_{\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) - \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)_{\nu, \alpha}. \quad (5.169)$$

Lo siguiente es calcular el primer término de la ecuación (5.167) haciendo uso de la ecuación (5.169), es decir, calcular el siguiente conmutador:

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

entonces, el primer conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_1 \right] = \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t). \quad (5.170)$$

Ahora se calculará el segundo término de la ecuación (5.167) teniendo en cuenta de igual manera la ecuación (5.169), es decir, se calculará el siguiente conmutador:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{H}_2 - \hat{H}_2 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \\
&= \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \hat{H}_2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t),
\end{aligned} \quad (5.171)$$

trabajando sobre el segundo término del anterior.

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

$$\begin{aligned}
&= -\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t)\hat{H}_2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\nu, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t),
\end{aligned}$$

se observa que en la expresión anterior, tanto β como α son índices mudos y debido a que $\hat{P}_{\mathbb{F}}^{\nu, \alpha, \gamma, \sigma} = \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma}$, se pueden sumar los términos:

$$\begin{aligned}
&-\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t)\hat{H}_2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\nu, \beta, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t) \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \\
&= -\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t)\hat{H}_2 + \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t),
\end{aligned}$$

obteniendo la siguiente expresión

$$-\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t)\hat{H}_2 + \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t). \quad (5.172)$$

Ahora, se reemplaza el término trabajado (5.172) en la ecuación (5.171), de manera que:

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

entonces se obtienen lo siguiente,

$$\left[\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2 \right] = \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t). \quad (5.173)$$

Ahora es necesario conocer el elemento de matriz $\hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma} = \langle \alpha, \nu | \hat{P}_{\mathbb{F}} | \gamma, \sigma \rangle$. Para lograrlo, se debe entender la forma de proyección en la base $|F_1, F_2; m_1, m_2\rangle$. Para calcular $\hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha, \nu, \gamma, \sigma}$,

se parte de la definición de $\hat{P}_{\mathbb{F}}$ como el proyector $\hat{P}_{\mathbb{F}} = \sum_{m_{\mathbb{F}}=-\mathbb{F}}^{\mathbb{F}} |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}|$. Ahora, al calcular el producto punto $\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2$ aplicado a $|\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle$, se obtiene:

$$\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle = \frac{1}{2} (\mathbb{F}^2 - \mathbf{F}_1^2 - \mathbf{F}_2^2) |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle,$$

según la teoría del momento angular, se sabe que

$$\mathbb{F}^2 |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle = \mathbb{F}(\mathbb{F} + 1) |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle$$

y también $\mathbf{F}_i^2 |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle = F_i(F_i + 1) |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle$ con $i = 1, 2$ de tal manera que toma la siguiente forma:

$$\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle = \frac{1}{2} [\mathbb{F}(\mathbb{F} + 1) - 2F(F + 1)] |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle, \quad (5.174)$$

donde $F_1 = F_2 = F$. Por otro lado, se presenta la siguiente relación $\sum_{\mathbb{F}} \hat{P}_{\mathbb{F}} = \mathbb{I}_{\mathbb{F}} = \mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2$ y al aplicar el bra $\langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}|$ a la ecuación (5.174), se obtiene:

$$\underbrace{\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} |\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}|}_{=\hat{\mathcal{I}}} = \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} \frac{1}{2} [\mathbb{F}(\mathbb{F} + 1) - 2F(F + 1)] \underbrace{|\mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}\rangle \langle \mathbb{F}, m_{\mathbb{F}}|}_{=\hat{P}_{\mathbb{F}}},$$

lo que implica:

$$\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 = \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} \frac{1}{2} [\mathbb{F}(\mathbb{F} + 1) - 2F(F + 1)] \hat{P}_{\mathbb{F}}, \quad (5.175)$$

además, se conoce que los operadores de proyección cumplen con $\hat{P}_{\mathbb{F}}^n = \hat{P}_{\mathbb{F}}$ y $\hat{P}_{\mathbb{F}} \hat{P}'_{\mathbb{F}} = \hat{0}$, por lo tanto se obtiene:

$$(\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2)^n = \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} \frac{1}{2^n} [\mathbb{F}(\mathbb{F} + 1) - 2F(F + 1)]^n \hat{P}_{\mathbb{F}}^n, \quad (5.176)$$

de modo que se muestra la siguiente relación:

$$\mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2 = \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} \frac{1}{2} [(+1) - 2F(F+1)] \hat{P}_{\mathbb{F}}. \quad (5.177)$$

Dado que $F = 1$, solo se tienen las siguientes proyecciones:

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 &= \frac{1}{3} (\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 - \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2), \\ \hat{P}_2 &= \frac{1}{3} (2\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbf{F}_1 \cdot \mathbf{F}_2), \end{aligned} \quad (5.178)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{P}_0^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= \frac{1}{3} (\delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} - \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle), \\ \hat{P}_2^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= \frac{1}{3} (2\delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} + \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle). \end{aligned} \quad (5.179)$$

Al reemplazar lo anterior en la ecuación (5.173), se obtiene:

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2] &= \sum_{\mathbb{F}=0,2}^{2F} g_{\mathbb{F}} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{P}_{\mathbb{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \\ &= \sum_{\alpha} \frac{g_0 + 2g_2}{3} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \frac{g_2 - g_0}{3} \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

es decir,

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t), \hat{H}_2] &= \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (5.180)$$

Una vez que se han calculado los conmutadores (5.170) y (5.180), se procede a sustituir los resultados en la ecuación de Heisenberg (5.166), la cual queda de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) + \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\nu(\mathbf{r}, t) \\
& + \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}, t).
\end{aligned} \tag{5.181}$$

Se realiza la aproximación de $T = 0$. Por lo tanto, los operadores de campo solo serán el primer término de la suma;

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger \approx \phi_{0,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^\dagger, \\
\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha} \approx \phi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}.
\end{aligned} \tag{5.182}$$

Entonces, la ecuación (5.181) para el estado base se escribirá así:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \hat{b}_{0,\nu} = & \hat{H}_0 \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\nu} + \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \phi_{0,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \phi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha} \phi_{0,\nu}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\nu} \\
& + \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \phi_{0,\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \phi_{0,\gamma}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\gamma} \cdot \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle \phi_{0,\sigma}(\mathbf{r}, t) \hat{b}_{0,\sigma},
\end{aligned} \tag{5.183}$$

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

$$\psi_{0,\alpha}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{n_\alpha}{N}} \phi_{0,\gamma}(\mathbf{r}, t), \tag{5.184}$$

con N siendo el número total de partículas y n_α el número de partículas en el estado de espín α , con esta definición y teniendo en cuenta, que en el límite termodinámico los operadores $\hat{b}_{0,\alpha} \approx \sqrt{n_\alpha}$, $\hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \approx \sqrt{n_\alpha}$ la ecuación (5.183) se reescribe como:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \psi_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \hat{H}_0 \psi_\nu(\mathbf{r}, t) + \frac{g_0 + 2g_2}{3} N \sum_{\alpha} \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \psi_\alpha(\mathbf{r}, t) \psi_\nu(\mathbf{r}, t) \\
& + \frac{g_2 - g_0}{3} N \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \mathbf{F} | \gamma \rangle \psi_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \psi_\gamma(\mathbf{r}, t) \cdot \langle \nu | \mathbf{F}' | \sigma \rangle \psi_\sigma(\mathbf{r}, t),
\end{aligned} \tag{5.185}$$

teniendo en cuenta que N es una constante, esta puede ser introducida en g_2 y g_0 , definiéndose ahora como $g_2 = \frac{4\pi\hbar^2 Na_2}{m}$ y $g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 Na_0}{m}$. Utilizando la notación para los elementos de matriz $\langle\alpha|\mathbf{F}|\gamma\rangle = \mathbf{F}^{\alpha\gamma}$, $\langle\nu|\mathbf{F}'|\sigma\rangle = \mathbf{F}'^{\nu\sigma}$, y sustituyendo $\hat{H}_0$ dada por la ecuación (4.95), la ecuación previa en la representación de las coordenadas se expresa como:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}, t) + \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \\ + \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}'^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t). \quad (5.186)$$

Se desarrollarán los términos de la ecuación (5.186). Dado que esta ecuación representa un sistema de ecuaciones diferenciales, una para cada valor de ν , se centrará ahora en los dos últimos términos para expresar explícitamente estas tres ecuaciones. Al expandir la suma del segundo término, se obtiene:

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) = \psi_{-1}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, \nu'} \\ + \psi_0^*(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, \nu'} \\ + \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \psi_1(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, \nu'}, \\ = (|\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, \nu'},$$

en otras palabras, este término puede expresarse de la siguiente manera:

$$(|\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2) (\psi_{-1}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, -1} + \psi_0(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, 0} + \psi_1(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, 1}).$$

Para simplificar la notación, se define $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi$. De esta manera, el segundo término de la expresión puede ser reescrito como:

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t) = (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_1|^2) (\psi_{-1} \delta_{\nu, -1} + \psi_0 \delta_{\nu, 0} + \psi_1 \delta_{\nu, 1}). \quad (5.187)$$

Para abordar el último término de la expresión (5.186), se recuerda la representación de la matriz de espín $\mathbf{F} = \hat{F}_i \hat{e}_i = \hat{F}_x \hat{i} + \hat{F}_y \hat{j} + \hat{F}_z \hat{k}$, donde las componentes de la matriz son:

$$\hat{F}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.188)$$

Es importante destacar que las componentes de la matriz de espín no incluyen el factor $\hbar$, ya que se está trabajando en unidades adimensionales. Al expandir el término y teniendo en cuenta que $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi$, se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^* \psi_{\gamma} \cdot \mathbf{F}'^{\nu\sigma} \psi_{\sigma} = & [\mathbf{F}^{-1,-1} \psi_{-1}^* \psi_{-1} + \mathbf{F}^{-1,0} \psi_{-1}^* \psi_0 + \mathbf{F}^{-1,1} \psi_{-1}^* \psi_1 + \mathbf{F}^{0,-1} \psi_0^* \psi_{-1} \\ & + \mathbf{F}^{0,0} \psi_0^* \psi_0 + \mathbf{F}^{0,1} \psi_0^* \psi_1 + \mathbf{F}^{1,-1} \psi_1^* \psi_{-1} + \mathbf{F}^{1,0} \psi_1^* \psi_0 \\ & + \mathbf{F}^{1,1} \psi_1^* \psi_1] \cdot [\mathbf{F}^{-1,-1} \psi_{-1} \delta_{\nu,-1} + \mathbf{F}^{0,-1} \psi_{-1} \delta_{\nu,0} \\ & + \mathbf{F}^{1,-1} \psi_{-1} \delta_{\nu,1} + \mathbf{F}^{-1,0} \psi_0 \delta_{\nu,-1} + \mathbf{F}^{0,0} \psi_0 \delta_{\nu,0} \\ & + \mathbf{F}^{1,0} \psi_0 \delta_{\nu,1} + \mathbf{F}^{-1,1} \psi_1 \delta_{\nu,-1} + \mathbf{F}^{0,1} \psi_1 \delta_{\nu,0} + \mathbf{F}^{1,1} \psi_1 \delta_{\nu,1}] , \end{aligned} \quad (5.189)$$

considerando el siguiente convenio para las componentes de la matriz de espín (5.188):

$$\begin{pmatrix} -1, -1 & -1, 0 & -1, 1 \\ 0, -1 & 0, 0 & 0, 1 \\ 1, -1 & 1, 0 & 1, 1 \end{pmatrix}. \quad (5.190)$$

La expresión (5.189) se simplifica y factoriza de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}'^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = & \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{i} (\psi_{-1}^* \psi_0 + \psi_0^* \psi_{-1} + \psi_0^* \psi_1 + \psi_1^* \psi_0) \right. \\ & + \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{j} (\psi_0^* \psi_{-1} - \psi_{-1}^* \psi_0 + \psi_1^* \psi_0 - \psi_0^* \psi_1) \\ & \left. + \hat{k} (|\psi_{-1}|^2 - |\psi_1|^2) \right] \cdot \\ & \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{i} (\psi_{-1} \delta_{\nu,0} + \psi_0 \delta_{\nu,-1} + \psi_0 \delta_{\nu,1} + \psi_1 \delta_{\nu,0}) \right. \\ & + \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{j} (\psi_{-1} \delta_{\nu,0} - \psi_0 \delta_{\nu,-1} + \psi_0 \delta_{\nu,1} - \psi_1 \delta_{\nu,0}) \\ & \left. + \hat{k} (\psi_{-1} \delta_{\nu,-1} - \psi_1 \delta_{\nu,1}) \right], \end{aligned} \quad (5.191)$$

desarrollando el producto punto y sus respectivas simplificaciones se llega a la forma simplificada dada por:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \mathbf{F}^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}, t) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}'^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = & \delta_{\nu, -1} [|\psi_0|^2 \psi_{-1} + \psi_1^* \psi_0 \psi_0 + \psi_{-1} (|\psi_{-1}|^2 - |\psi_1|^2)] \\ & + \delta_{\nu, 0} [|\psi_{-1}|^2 \psi_0 + 2\psi_0^* \psi_{-1} \psi_1 + |\psi_1|^2 \psi_0] \\ & + \delta_{\nu, 1} [\psi_{-1}^* \psi_0 \psi_0 + |\psi_0|^2 \psi_1 - \psi_1 (|\psi_{-1}|^2 - |\psi_1|^2)]. \end{aligned} \quad (5.192)$$

Al sustituir las ecuaciones (5.192) y (5.187) en (5.186) y realizar todas las operaciones algebraicas necesarias, se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_{\nu}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \right] (\psi_{-1}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, -1} + \psi_0(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, 0} + \psi_1(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu, 1}) \\ & + \delta_{\nu, -1} \{ \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) [(c_0 + c_2) (|\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2) + (c_0 - c_2) |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2] \\ & + c_2 \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t) \} \\ & + \delta_{\nu, 0} \{ \psi_0(\mathbf{r}, t) [(c_0 + c_2) (|\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2) + c_0 |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2] \\ & + 2c_2 \psi_0^*(\mathbf{r}, t) \psi_1 \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) \} \\ & + \delta_{\nu, 1} \{ \psi_1(\mathbf{r}, t) [(c_0 + c_2) (|\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2) + (c_0 - c_2) |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2] \\ & + c_2 \psi_{-1}^*(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t) \psi_0(\mathbf{r}, t) \}. \end{aligned} \quad (5.193)$$

La última expresión representa un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, una para cada componente de espín, describiendo así un condensado de Bose-Einstein espinorial. Finalmente, se definen las constantes $c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}$ y $c_2 = \frac{g_2 - g_0}{3}$ se destaca que el comportamiento del sistema está determinado por el signo de estas constantes: si $c_2 < 0$, el sistema exhibirá un comportamiento ferromagnético, mientras que si $c_2 > 0$, mostrará un comportamiento polar, según se indica en la referencia (Ho, 1998).

Para este estudio, la ecuación (5.193) representa un sistema de dos ecuaciones, dado que solo se considerarán dos estados hiperfinos con proyección de espín $+1$ y -1 . En otras palabras, se excluye el término cero,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \psi_\nu(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) \right] (\psi_{-1}(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu,-1} + \psi_1(\mathbf{r}, t) \delta_{\nu,1}) \\
& + \delta_{\nu,-1} \psi_{-1}(\mathbf{r}, t) [g_2 |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2 + g_3 |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2] \\
& + \delta_{\nu,1} \psi_1(\mathbf{r}, t) [g_2 |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + g_3 |\psi_{-1}(\mathbf{r}, t)|^2],
\end{aligned} \tag{5.194}$$

donde $g_2 = c_0 + c_2$ y $g_3 = c_0 - c_2 = \frac{2g_0 + g_2}{3}$.

Hasta este punto, no se ha especificado cuál es el potencial externo. Este trabajo se centrará en potenciales de red óptica bidimensionales, los cuales están definidos por:

$$V_{ext}(\mathbf{r}, t) = V_{ext}(\mathbf{r}) = V_0 [\cos^2(kx) + \cos^2(ky)], \tag{5.195}$$

donde $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j}$; V_0 es la profundidad del potencial en cada punto (x, y) y la energía de retroceso dada por,

$$E_r = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m\lambda^2}. \tag{5.196}$$

En resumen, en este capítulo se abordó la deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii escalar, la cual se deriva del Hamiltoniano (5.139) en segunda cuantización y supone un potencial de interacción entre pares de partículas (4.137). Utilizando este Hamiltoniano, se procedió a evolucionar con la ecuación de Heisenberg (5.140), realizando los cálculos respectivos de los conmutadores y considerando sus relaciones de conmutación, lo que permitió mostrar la expresión (5.146). Si se desea describir un gas a $T = 0$, se sabe que a esta temperatura las partículas del gas pasan a ocupar el estado base de una partícula. En consecuencia, los operadores de campo pueden ser sustituidos por el primer término de la suma (5.147). Finalmente, se obtuvo la expresión (5.150), que corresponde a la ecuación de Gross-Pitaevskii escalar, describiendo un condensado de Bose-Einstein con interacciones a temperatura cero.

En segundo lugar, se presenta la deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii espinorial, la cual es de suma relevancia para el desarrollo de este trabajo. Se partió del Hamiltoniano en

términos de los operadores de creación y aniquilación (5.151). A diferencia del caso escalar, se introdujo un índice adicional α y β , que denotan la proyección de espín (5.152). De manera similar, se asignó un índice adicional a los operadores de campo de creación y aniquilación (5.154), haciendo referencia a la proyección de espín y cumpliendo con las relaciones de conmutación (5.155). Al abordar el término de interacción atómica, se trabajó únicamente con partículas bosónicas. De forma análoga al caso escalar, se procedió a calcular la evolución temporal del Hamiltoniano expresado con el espín (5.165), utilizando la ecuación de Heisenberg (5.166). Se calcularon los conmutadores teniendo en cuenta sus respectivas relaciones de conmutación, y se aplicó la teoría del momento angular, dado que solo se trabajó con partículas de espín entero igual a uno. Asimismo, de manera análoga al caso escalar, se aplicó el límite termodinámico y, tras realizar cálculos adicionales y simplificar términos, se llegó a la ecuación (5.193), que representa un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, una para cada componente de espín.

Como se menciona a lo largo del trabajo, se consideraron dos estados hiperfinos con proyección de espín $+1$ y -1 , por lo que la ecuación de Gross-Pitaevskii espinorial adquiere la forma dada por la ecuación (5.194), donde el potencial externo es una red óptica bidimensional (5.195). En el siguiente capítulo, se presentarán los métodos numéricos para resolver el sistema de ecuaciones dado por la ecuación (5.194).

Capítulo 6

Solución numérica a la ecuación de Gross-Pitaevskii

La ecuación derivada en el capítulo anterior, como se indicó previamente, constituye un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales que carecen de solución analítica. En este capítulo, se presentarán métodos numéricos para abordar la resolución de este sistema de ecuaciones, con un interés particular en determinar el estado estacionario del sistema. El primer paso consiste en usar el método de evolución en tiempo imaginario.

6.1. Evolución en tiempo imaginario

Para determinar el estado estacionario del sistema, se emplea el método de evolución en tiempo imaginario (Bader et al., 2013). Este método iterativo evoluciona una semilla dada hasta alcanzar el estado de energía más baja del sistema. A continuación, se explica el funcionamiento de este método. Dado que el Hamiltoniano es un operador hermítico, sus autoenergías son números reales. Además, con un potencial adecuado, estas autoenergías pueden ser positivas. Sea $\hat{H}$ un Hamiltoniano que cumple con estas características, y $\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_i(\mathbf{r})$ la función de onda que describe el sistema en $t = 0$. Podemos encontrar el estado que describe el sistema en un tiempo t , es decir, $\psi(\mathbf{r}, t)$, utilizando el operador de evolución temporal de la siguiente manera:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \psi_i(\mathbf{r}). \quad (6.197)$$

Por otro lado, las autofunciones del Hamiltoniano, $\phi_k(\mathbf{r})$, conforman una base, por lo tanto, se puede expresar la condición inicial para la función de onda como una combinación lineal de dichas autofunciones, es decir, $\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_k C_k \phi_k(\mathbf{r})$. Reemplazando esto en la ecuación (6.197), la solución se puede escribir como:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} C_k \phi_k(\mathbf{r}), \quad (6.198)$$

donde E_k es la energía asociada a la autofunción $\phi_k(\mathbf{r})$. Ahora, realizamos un cambio de variable en la coordenada temporal, es decir, $t = -i\tau'$, con $\tau' \in \Re$. Esto conduce a una ecuación disipativa, lo que implica que la energía disminuye a medida que transcurre el tiempo. Este enfoque resulta útil para identificar estados de energía mínima. En consecuencia, obtenemos:

$$\psi(\mathbf{r}, -i\tau') = \sum_k e^{-\frac{E_k \tau'}{\hbar}} C_k \phi_k(\mathbf{r}). \quad (6.199)$$

De esta última ecuación, se observa que para valores suficientemente grandes de τ' , el término dominante en la suma es aquel asociado a la menor energía, dado que la exponencial atenúa los términos de mayor energía. Por lo tanto, podemos aproximar la solución como:

$$\psi(\mathbf{r}, -i\tau') \approx e^{-\frac{E_0 \tau'}{\hbar}} C_0 \phi_0(\mathbf{r}), \quad (6.200)$$

siendo E_0 la menor energía del sistema, a esta evolución en τ' se le denomina evolución en tiempo imaginario. Es importante destacar que la convergencia de este método está condicionada a la separación entre los valores propios de las energías del Hamiltoniano. Además, al considerar que el Hamiltoniano en cuestión posee estados propios degenerados, el estado resultante es una combinación lineal de estos. Por lo tanto, mediante este método se obtendrán estados estacionarios del sistema que no necesariamente corresponden al estado fundamental. La transformación $t = -i\tau'$ modifica la ecuación de Schrödinger de la siguiente manera:

$$-\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.201)$$

La evolución en tiempo imaginario no solo puede ser utilizada como un método independiente para abordar problemas de evolución temporal, sino que también se puede combinar con métodos para resolver ecuaciones diferenciales. En este caso, se ha seleccionado el método de Runge-Kutta de cuarto orden para llevar a cabo la evolución. A continuación, se proporcionará una breve descripción de su aplicación.

6.2. Método de Runge-Kutta de cuarto orden

El método de Runge-Kutta no es simplemente un único método, sino una familia de métodos iterativos, tanto implícitos como explícitos, diseñados para aproximar las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO). El más ampliamente utilizado dentro de esta familia es el Runge-Kutta de cuarto orden, comúnmente conocido como “RK4”. Este método iterativo se emplea para resolver ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = f(\psi, t). \quad (6.202)$$

Dada una condición inicial $\psi(\mathbf{r}, t_0)$, la solución a la ecuación en un tiempo $t = t_0 + \Delta t$ está dada por:

$$\psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \psi(\mathbf{r}, t_0) + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (6.203)$$

donde las constantes k_1 , k_2 , k_3 y k_4 están dadas por:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(\psi(\mathbf{r}, t_0), t), \\ k_2 &= f\left(\psi(\mathbf{r}, t_0) + \frac{k_1 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_3 &= f\left(\psi(\mathbf{r}, t_0) + \frac{k_2 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_4 &= f(\psi(\mathbf{r}, t_0) + k_3 \Delta t, t + \Delta t). \end{aligned} \quad (6.204)$$

De esta manera, se itera para evolucionar hasta el tiempo deseado. Este método será empleado tanto para resolver la evolución en tiempo imaginario, con el objetivo de encontrar el estado estacionario del sistema, como para abordar la evolución en tiempo real y estudiar la dinámica del sistema. Ahora procederemos a realizar la reducción dimensional de la ecuación de Gross-Pitaevskii.

6.3. Reducción dimensional de la ecuación de Gross-Pitaevskii

En la práctica, para generar un condensado cuasi-2D, se emplea la estrategia de confinar el gas en una trampa armónica inhomogénea, donde una de las frecuencias, w_z , es significa-

tivamente mayor que las otras dos, w_x y w_y , respectivamente. Este enfoque transforma la forma de la nube, pasando de tener una estructura tridimensional a la de un disco delgado, característico de un condensado cuasi-2D. Esta manipulación restringe las dimensiones en las que las partículas pueden moverse. A continuación, se abordará cómo esta restricción en el condensado influye en la deducción de una ecuación que describa su comportamiento en dos dimensiones.

6.3.1. Ecuación 2D

Para lograr un condensado en dos dimensiones, se ajusta una de las frecuencias de la trampa armónica de tal manera que $w_z \gg w_r$, donde $w_r = w_x = w_y$. Este ajuste provoca una transición en la forma de la nube, pasando de tener una estructura esférica a la de un disco, lo que implica que las partículas están efectivamente restringidas a moverse en dos dimensiones. Además, debido a la marcada diferencia en los valores de las frecuencias de la trampa, la separación de los niveles de energía en la dirección z es mucho mayor que en las direcciones x y y . Esto permite suponer que la dinámica en la dirección z se desacopla de la dinámica en x e y . En consecuencia, la función de onda del sistema en z se encuentra en el estado base del oscilador armónico. Con estos elementos en consideración, se propone aproximar la función de onda del condensado 3D como:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx \psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}(z), \quad (6.205)$$

siendo $\phi_{1D}(z)$ el oscilador armónico 1D para el estado fundamental en la dirección z ,

$$\phi_{1D}(z) = \left(\frac{1}{\pi l_z^2} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2l_z^2} z^2} \quad \text{con} \quad l_z = \sqrt{\frac{\hbar}{mw_z}}. \quad (6.206)$$

La función $\psi_{2D}(x, y, t)$ describe la dinámica temporal de un condensado en forma de disco 2D situado en el plano (x, y) . Sustituyendo la expresión (6.205) en la ecuación (5.150), obtenemos:

$$i\hbar \frac{\partial (\psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}(z))}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g |\psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}(z)|^2 N \right] \psi_{2D}(x, y, t) \phi_{1D}(z), \quad (6.207)$$

donde el Hamiltoniano $\hat{H}_0$ de la ecuación (6.207) posee un potencial tipo oscilador armónico 3D, es decir, tiene la siguiente forma:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2}mw_{\perp}(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}mw_z^2 z^2.$$

Teniendo en cuenta lo anterior y reorganizando términos, la expresión (6.207) adquiere la siguiente forma:

$$\begin{aligned} i\hbar\phi_{1D}(z)\frac{\partial\psi_{2D}(x,y,t)}{\partial t} &= \phi_{1D}(z) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2}mw_{\perp}^2(x^2 + y^2) \right] \psi_{2D}(x,y,t) \\ &+ \psi_{2D}(x,y,t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}mw_z^2 z^2 \right] \phi_{1D}(z) \\ &+ gN |\psi_{2D}(x,y,t)\phi_{1D}(z)|^2 \psi_{2D}(x,y,t)\phi_{1D}(z), \end{aligned} \quad (6.208)$$

El segundo término de la expresión, $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}mw_z^2 z^2 \right]$, corresponde a la energía del oscilador unidimensional $E_{1D} = \frac{\hbar}{2m}w_z$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned} i\hbar\phi_{1D}(z)\frac{\partial\psi_{2D}(x,y,t)}{\partial t} &= \phi_{1D}(z)\hat{H}_{2D}\psi_{2D}(x,y,t) \\ &+ \psi_{2D}(x,y,t)E_{1D}\phi_{1D}(z) \\ &+ gN |\psi_{2D}(x,y,t)\phi_{1D}(z)|^2 \psi_{2D}(x,y,t)\phi_{1D}(z), \end{aligned} \quad (6.209)$$

o escrita como:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{2D}(x,y,t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_{2D} + E_{1D} + M(x,y) \right] \psi_{2D}(x,y,t), \quad (6.210)$$

donde $M(x,y)$ cumple con la siguiente ecuación,

$$M(x,y)\phi_{1D}(z) = gN |\psi_{2D}(x,y,t)\phi_{1D}(z)|^2 \phi_{1D}(z). \quad (6.211)$$

Para eliminar la dependencia en z , hay dos opciones disponibles. En primer lugar, se puede llevar a cabo la integración completa de la ecuación (6.211) con respecto a z a lo largo de todo el espacio:

$$\begin{aligned}
M(x, y) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{1D}(z) dz}_{=2^{1/2}\pi^{1/4}l_z^{1/2}} &= gN |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_{1D}(z)|^2 \phi_{1D}(z) dz}_{=\frac{2^{1/2}}{3^{1/2}\pi^{1/4}l_z^{1/2}}}, \\
M(x, y)(2^{1/2}\pi^{1/4}l_z^{1/2}) &= gN \left(\frac{2^{1/2}}{3^{1/2}\pi^{1/4}l_z^{1/2}} \right) |\psi_{2D}(x, y, t)|^2, \\
M(x, y) &= gN \left(\frac{1}{3^{1/2}\pi^{1/2}l_z} \right) |\psi_{2D}(x, y, t)|^2,
\end{aligned}$$

es decir,

$$M(x, y) = g \left(\frac{1}{\sqrt{3\pi}l_z} \right) N |\psi_{2D}(x, y, t)|^2. \quad (6.212)$$

En segundo lugar, se puede multiplicar cada término de la ecuación (6.211) por $\phi_{1D}(z)^*$ y llevar a cabo la integración en todo el espacio. Aquí se satisface que $\iint dx dy |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 = 1$ y también $\int dz |\phi_{1D}(z)|^2 = 1$, lo que indica que las funciones están normalizadas.

$$\begin{aligned}
M(x, y) \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\phi_{1D}(z)\phi_{1D}(z)^*}_{=|\phi_{1D}(z)|^2} dz &= gN |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_{1D}(z)|^2 \underbrace{\phi_{1D}(z)\phi_{1D}(z)^*}_{=|\phi_{1D}(z)|^2} dz, \\
M(x, y) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_{1D}(z)|^2 dz}_{=1} &= gN |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{|\phi_{1D}(z)|^2 |\phi_{1D}(z)|^2}_{=|\phi_{1D}(z)|^4} dz, \\
M(x, y) &= gN |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_{1D}(z)|^4 dz}_{=\frac{1}{2^{1/2}\pi^{1/2}l_z}}, \\
M(x, y) &= g \left(\frac{1}{2^{1/2}\pi^{1/2}l_z} \right) N |\psi_{2D}(x, y, t)|^2,
\end{aligned}$$

es decir,

$$M(x, y) = g \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}l_z} \right) N |\psi_{2D}(x, y, t)|^2. \quad (6.213)$$

Al sustituir las expresiones obtenidas (6.212) y (6.213) en la expresión (6.210), se obtiene una ecuación de Gross-Pitaevskii (GP) 2D efectiva que describe la dinámica del condensado.

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}(x, y, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_{2D} + E_{1D} + g_{2d}N |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \right] \psi_{2D}(x, y, t). \quad (6.214)$$

En la ecuación GP 2D efectiva, la definición de g_{2d} depende de la integral realizada en la ecuación GP 3D o en el funcional de energía. Se establece como $g_{2d} = g \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}l_z}$, donde $\alpha = 2$ o $\alpha = 3$. En este estudio, se selecciona $\alpha = 2$ debido a que los resultados son independientes de α , como se muestra en el artículo de referencia [Zamora-Zamora et al. \(2019\)](#), lo que conduce a la expresión simplificada

$$g_{2d} = g \frac{1}{\sqrt{2\pi}l_z}. \quad (6.215)$$

Teniendo en cuenta que el término E_{1D} es una constante que produce un corrimiento en la energía, se tiene:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}(x, y, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_{2D} + \underbrace{g_{2d}N}_{=g_{2D}} |\psi_{2D}(x, y, t)|^2 \right] \psi_{2D}(x, y, t), \quad (6.216)$$

donde $g_{2D} = g_{2d}N$, A continuación, se procederá con la adimensionalización de la ecuación (5.194) con el fin de reducir al máximo el número de parámetros libres.

6.3.2. Ecuación adimensional

Se llevará a cabo el tratamiento numérico de las ecuaciones de Gross-Pitaevskii en dos dimensiones, con el objetivo de obtener las ecuaciones efectivas que serán resueltas. El primer paso consiste en adimensionalizar la ecuación, para lo cual se establecen unidades de energía (ϵ), tiempo (τ), y longitud (l_0). Con estas unidades, se definen variables adimensionales de posición ($\tilde{\mathbf{r}}$) y tiempo ($\tilde{t}$), expresadas como:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}} &= \frac{1}{l_0} \mathbf{r}, \\ \tilde{t} &= \frac{t}{\tau}. \end{aligned} \quad (6.217)$$

Asimismo, es necesario considerar cómo se transforman las derivadas debido a la definición de las variables adimensionales:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{1}{l_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}, \\ \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}}.\end{aligned}\tag{6.218}$$

Finalmente, se introduce una función de onda adimensional definida por:

$$\tilde{\psi}_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = l_0 \psi_\alpha(\mathbf{r}, t).\tag{6.219}$$

Al sustituir las definiciones proporcionadas en (6.218) y (6.219) en la ecuación (5.194), se obtiene,

$$\begin{aligned}\frac{i\hbar}{\tau} \frac{\partial \tilde{\psi}_\nu(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2ml_0^2} \tilde{\nabla}^2 + \tilde{V}_{ext}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right] \left(\tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \delta_{\nu,-1} + \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \delta_{\nu,1} \right) \\ &+ \frac{1}{l_0^2} \delta_{\nu,-1} \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \left[g_2 \left| \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 + g_3 \left| \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 \right] \\ &+ \frac{1}{l_0^2} \delta_{\nu,1} \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \left[g_2 \left| \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 + g_3 \left| \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 \right].\end{aligned}\tag{6.220}$$

Aunque se esté trabajando con variables y funciones de onda adimensionales, la ecuación aún conserva unidades de energía. Por lo tanto, se procede a dividir la ecuación entre ϵ y se definen los siguientes parámetros para simplificarla al máximo.

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= \frac{\hbar}{\tau \epsilon}, \\ \gamma_1 &= \frac{\hbar^2}{2ml_0^2 \epsilon}, \\ \mathbf{v}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) &= \frac{\tilde{V}_{ext}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\epsilon}, \\ \mathbf{g}_0 &= \frac{g_{2D_0}}{l_0^2 \epsilon} = \frac{4\pi \hbar^2 N a_0}{\sqrt{2\pi} l_z l_0^2 m \epsilon}, \\ \mathbf{g}_2 &= \frac{g_{2D_2}}{l_0^2 \epsilon} = \frac{4\pi \hbar^2 N a_2}{\sqrt{2\pi} l_z l_0^2 m \epsilon}.\end{aligned}\tag{6.221}$$

Se aprovecha el hecho de que se está trabajando en dos dimensiones, utilizando la ecuación (6.215) para la constante de interacción. Con estos parámetros, la ecuación (6.220) adimensionalizada será:

$$\begin{aligned}
i\gamma_0 \frac{\partial \tilde{\psi}_\nu(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = & \left[-\gamma_1 \tilde{\nabla}^2 + \mathbf{v}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right] \left(\tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \delta_{\nu,-1} + \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \delta_{\nu,1} \right) \\
& + \delta_{\nu,-1} \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \left[\mathbf{g}_2 \left| \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 + \mathbf{g}_3 \left| \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 \right] \\
& + \delta_{\nu,1} \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \left[\mathbf{g}_2 \left| \tilde{\psi}_1(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 + \mathbf{g}_3 \left| \tilde{\psi}_{-1}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) \right|^2 \right],
\end{aligned} \tag{6.222}$$

donde $\mathbf{g}_3 = \frac{2\mathbf{g}_0 + \mathbf{g}_2}{3}$. A continuación, se presentará el valor numérico de las constantes que se definieron anteriormente.

6.3.3. Constantes

Para calcular el valor de las constantes que intervienen en la ecuación (6.222), es fundamental definir las unidades de energía, tiempo y longitud. Dado que se utilizará un potencial externo de redes ópticas (5.195), se emplearán las unidades naturales de estos potenciales. Estas unidades se definirán conforme a lo establecido en [Bloch et al. \(2008\)](#).

$$\epsilon = E_r, \quad l_0 = \frac{\lambda}{2}, \quad \tau = \frac{\hbar}{E_r}. \tag{6.223}$$

Sea E_r la energía de recoil definida en (5.196), donde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ y λ es la longitud de onda utilizada para definir la unidad de longitud l_0 . La equivalencia de τ se establece de modo que $\gamma_0 = 1$. A continuación, se calculan los valores de los parámetros en las respectivas unidades (ver Tabla 6.1).

Átomo	E_r	l_0	$\tau = \frac{\hbar}{E_r}$
^{87}Rb	$1.34367 \times 10^{-30} \text{ J}$	$5.32 \times 10^{-7} \text{ m}$	$7.84842 \times 10^{-5} \text{ s}$
^{23}Na	$5.0795 \times 10^{-30} \text{ J}$	$5.32 \times 10^{-7} \text{ m}$	$2.0761 \times 10^{-5} \text{ s}$
^{41}K	$2.8508 \times 10^{-30} \text{ J}$	$5.32 \times 10^{-7} \text{ m}$	$3.6991 \times 10^{-5} \text{ s}$
^7Li	$1.6644 \times 10^{-30} \text{ J}$	$5.32 \times 10^{-7} \text{ m}$	$6.3358 \times 10^{-5} \text{ s}$

Cuadro 6.1: Valor de las constantes para los diferentes átomos descritos a través de parámetros de unidades de energía, longitud y tiempo.

Para estos cálculos, se utilizó los valores reportados en los experimentos descritos por [Parker et al. \(2013\)](#). En dicho estudio, se proporciona la longitud de onda λ del láser utilizado para

crear la red óptica. Además, se considerarán los valores de la masa m y las longitudes a_i según las referencias de [Kawaguchi y Ueda \(2012\)](#) y [Stamper-Kurn y Ueda \(2013\)](#), así como los valores de las frecuencias de la trampa armónica según [Hadzibabic \(2008\)](#) y [C.-A. Chen y Hung \(2021\)](#). A continuación, se presentan los valores de los parámetros necesarios para calcular las constantes (ver Tabla 6.2).

Nombre	Símbolo	Valor
Número de partículas del condensado	N	400
Longitud del láser	λ	1064 nm
Frecuencia en dirección z	ω_z	$2\pi \times 5000$ rad/s
Valor de la constante de Planck reducida	$\hbar$	$1.054571817 \times 10^{-34}$ Js

Cuadro 6.2: Parámetros físicos utilizados en la simulación numérica.

Átomo (Espín)	Masa (u.m.a.)	a_0 (a_B)	a_2 (a_B)
$^{87}\text{Rb}, F = 1$	86.909 180 520(15)	101.8	100.4
$^{23}\text{Na}, F = 1$	22.9897692807(28)	50.0	55.0
$^{41}\text{K}, F = 1$	40.96182576(21)	68.5	63.5
$^7\text{Li}, F = 1$	7.01600455(8)	23.9	6.8

Cuadro 6.3: Los átomos se describen mediante varios parámetros, incluyendo su masa y amplitudes de dispersión.

Se presentan los valores de las especies de átomos considerados en este trabajo (ver Tabla 6.3). La Unidad de Masa Atómica (u.m.a.) se define como $1 \text{ u.m.a.} = 1.660538921(73) \times 10^{-24} \text{ g}$. Además, la amplitud de dispersión, denotada como a_i , se mide en relación con el radio de Bohr, que tiene un valor de $a_B = 5.2917721092(17) \times 10^{-11} \text{ m}$.

Capítulo 7

Resultados

El objetivo de este estudio es analizar la naturaleza del estado base de un condensado de Bose-Einstein espinorial. La diferencia entre las longitudes de dispersión de onda a_0 y a_2 determina la naturaleza del condensado de espín-1 (Klausen et al., 2001). El estado cuando $a_0 > a_2$, indicando que las partículas con diferente estado hiperfino de espín, es decir, $+1$ o -1 , ocupan diferentes regiones del espacio. En este trabajo, a este estado se le denomina separación de fases. Por otro lado, el estado cuando $a_0 < a_2$, lo que significa que las partículas con diferente estado hiperfino de espín, es decir, $+1$ o -1 , pueden ocupar la misma región del espacio. En este trabajo, a este estado se le denomina estado de mezcla.

Nombre	Símbolo	Valor
Número de puntos de la cuadrícula en la dirección x	N_x	512
Número de puntos de la cuadrícula en la dirección y	N_y	512
Extensión espacial de la malla numérica en la dirección x	L_x	40
Extensión espacial de la malla numérica en la dirección y	L_y	40
Tamaño de paso utilizado en la evolución en tiempo real	$d\tau$	0.015
Numero de pasos para encontrar los estacionarios		80000
Profundidad del potencial	V_0	3

Cuadro 7.1: Parámetros de la simulación numérica.

En este capítulo se presentan los resultados del estudio sobre la separación de fases en un condensado de Bose-Einstein espinorial confinado en una red óptica bidimensional. Se utiliza la magnetización como observable física para caracterizar si el estado estacionario de los diferentes átomos, es un estado de mezcla o un estado de separación. Los átomos considerados en el estudio son ^{87}Rb , ^{23}Na , ^{41}K y ^7Li , cuyas longitudes de dispersión de ondas s , a_0 y a_2 se encuentran detalladas en la Tabla 6.3. A continuación, se muestra una tabla con los parámetros utilizados en el código para la simulación numérica de este trabajo (ver Tabla

7.1). Para caracterizar este sistema, se utilizó la ecuación de Gross-Pitaevskii, que describe un condensado espinorial mediante dos ecuaciones acopladas, como se presenta en la ecuación (5.194). Mediante los métodos numéricos descritos en el capítulo 6, se resolvió la ecuación (5.194) utilizando el método de evolución en tiempo imaginario. Los posibles estados obtenidos se ilustran en la Figura 7.1. De izquierda a derecha, en la primera columna, se presenta la **Semilla** completamente aleatoria, representando un estado de puro desorden (ruido). En la segunda columna, se observa una **Mezcla**, con ambas componentes distribuidas por toda la red, mostrando una población que se extiende a lo largo de la gráfica. En la tercera columna, se muestra la **Separación**, donde las componentes están ubicadas una a la izquierda y otra a la derecha, ocupando diferentes regiones del espacio.

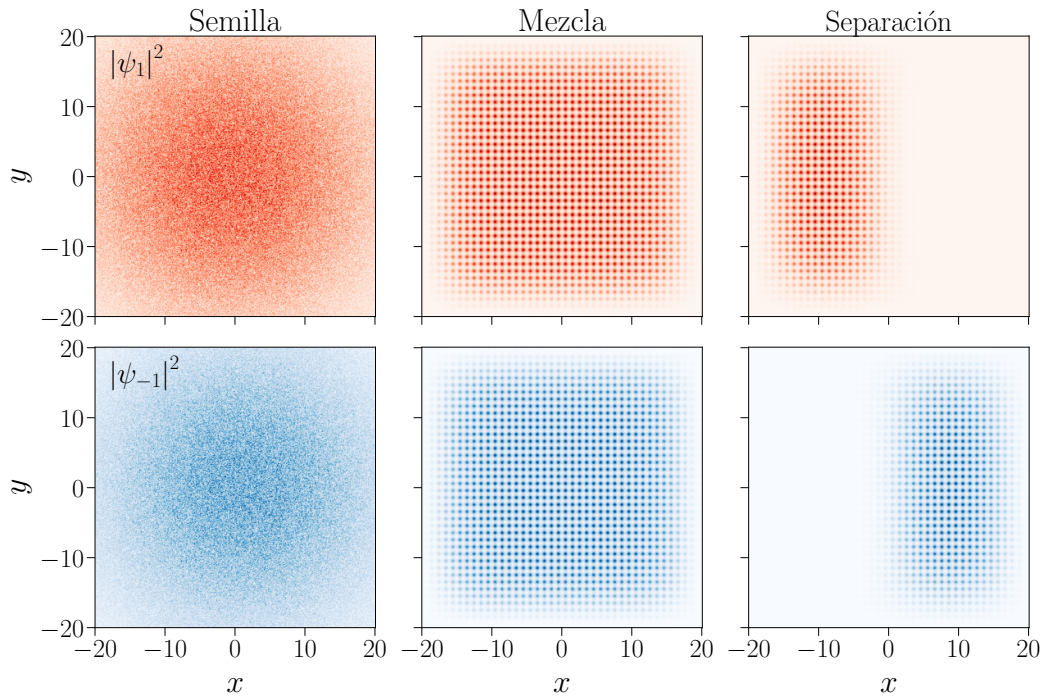


Figura 7.1: Se grafica la norma al cuadrado de la función de onda. De izquierda a derecha, se presentan la semilla, el estado estacionario en mezcla y el estado estacionario en separación de fase. Los renglones superior e inferior (rojo y azul) corresponden a la función ψ_1 y ψ_{-1} , respectivamente.

Para caracterizar la naturaleza del estado base obtenido mediante la solución de la ecuación de Gross-Pitaevskii, se propone utilizar la magnetización como observable. La magnetización izquierda, $m_I(t)$, y derecha, $m_D(t)$, se definen en términos de la magnetización local

$m(x, y, t) = \rho_1(x, y, t) - \rho_{-1}(x, y, t)$, donde $\rho_1(x, y, t)$ y $\rho_{-1}(x, y, t)$ representan las densidades de probabilidad asociadas con las componentes $\psi_1(x, y, t)$ y $\psi_{-1}(x, y, t)$, respectivamente. Dado que la magnetización en el lado izquierdo $m_I(t)$ y en el lado derecho $m_D(t)$ proporcionan resultados equivalentes, se opta por emplear las magnetizaciones en el lado izquierdo, definidas de la siguiente manera:

$$m_I(t) = \iint_{\Omega_I} dx dy m(x, y, t), \quad (7.224)$$

donde Ω_I a la mitad izquierda del sistema. Esta magnetización cumple con lo siguiente:

$$m_I(t) = \iint_{\Omega_I} |\psi_1|^2 - |\psi_{-1}|^2 dx dy \approx \begin{cases} 0 & \text{si es Mezcla} \\ \neq 0 & \text{es Separación} \end{cases} \quad (7.225)$$

La magnetización muestra comportamientos distintos al variar los parámetros de dispersión a_0 y a_2 . En este trabajo se estudió cómo varía la magnetización en el estado estacionario del sistema como función de las longitudes de dispersión, con el fin de caracterizar dicho estado como un estado de mezcla o un estado de separación. Para esto, se realizaron los siguientes casos.

1. Variando a_0 y manteniendo a_2 constante:

- Se estudia el comportamiento de la magnetización izquierda ante diversas modificaciones en a_0 .

2. Variando a_2 y manteniendo a_0 constante:

- Se estudia el comportamiento de la magnetización izquierda ante diversas modificaciones en a_2 .

En las Figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 se ilustra el comportamiento de la magnetización al variar las longitudes de dispersión a_0 y a_2 para un gas espinorial compuesto por átomos de ^{87}Rb , ^{23}Na , ^{41}K y ^7Li , respectivamente. En dichas figuras, se grafica en color azul la magnetización izquierda en el estado estacionario del sistema como función de a_0 , mientras que en color rojo se grafica la magnetización como función de a_2 . Se puede observar cómo al aumentar a_0

manteniendo a_2 constante, se pasa de un estado de mezcla a uno separado. Por el contrario, al aumentar a_2 manteniendo constante a_0 se pasa de un estado separado a uno de mezcla. En la Figura 7.2, se toma el punto donde se cortan las gráficas como el valor mínimo de la magnetización a partir del cual su estado será un estado de separación, el cual tiene un valor aproximado de 0.02. En dicha figura, se puede observar que variando a_2 (curva roja), es posible pasar de separación a un estado de mezcla, mientras que solo variando a_0 (curva azul), se puede pasar de un estado de mezcla a separación. De igual manera, se observa que para un gas de átomos de sodio (Figura 7.3) o de potasio (Figura 7.4), se pasa de un estado de mezcla a separación y de separación a mezcla variando sus longitudes de dispersión de onda s . Sin embargo, para el caso de litio en la Figura 7.6, se observa que solo variando a_2 (línea roja) no es posible pasar de un estado de mezcla a un estado de separación, ya que el comportamiento del estado permanece en mezcla.

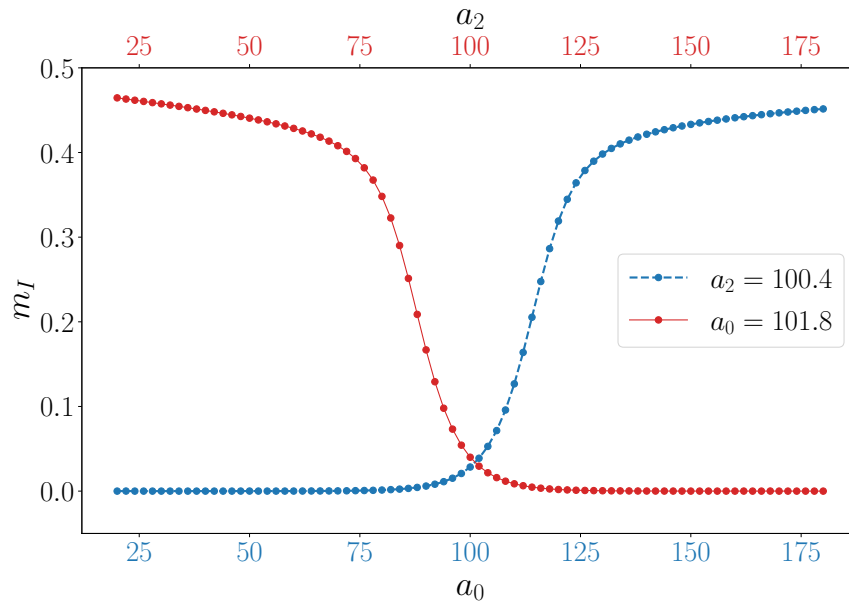


Figura 7.2: Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{87}Rb .

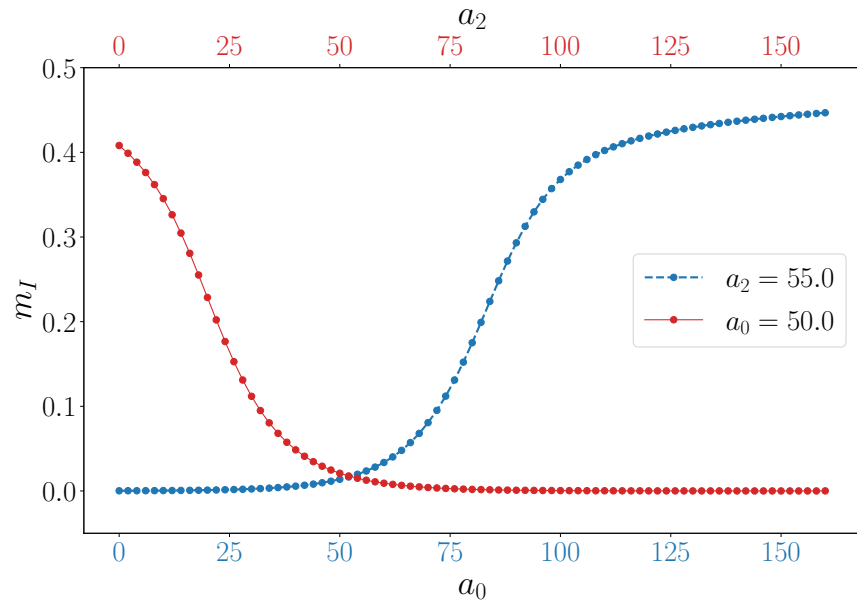


Figura 7.3: Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{23}Na .

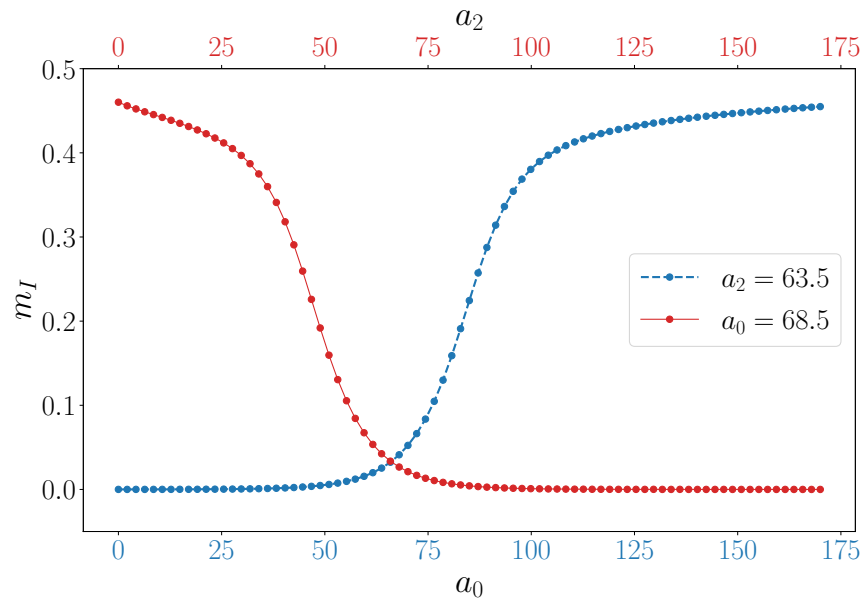


Figura 7.4: Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^{41}K .

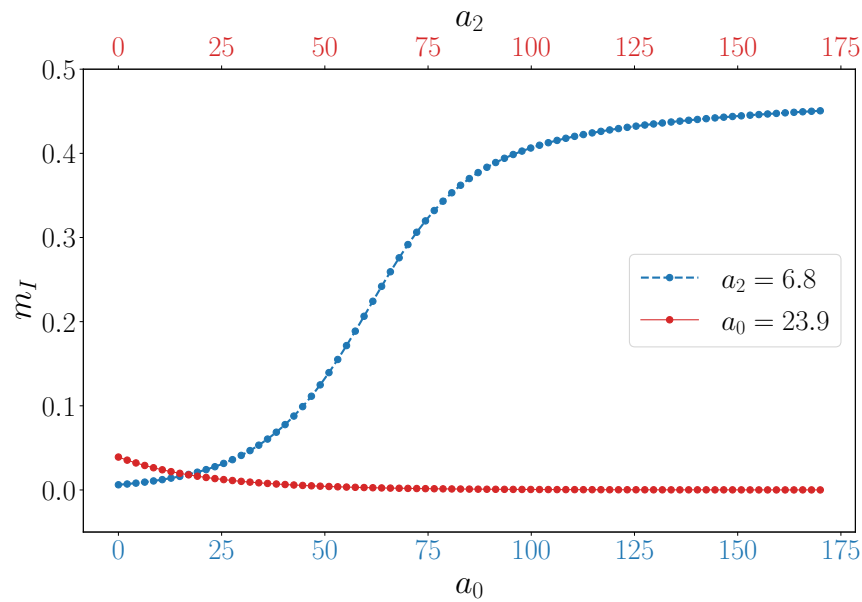


Figura 7.5: Se presenta el comportamiento de la magnetización izquierda m_I . En la línea azul, varía a_0 mientras se mantiene a_2 constante, y en la línea roja, varía a_2 mientras se mantiene a_0 constante, para un gas compuesto por átomos de ^7Li .

Por otro lado, se quiso realizar una investigación más amplia, para lo cual se variaron a_0 y a_2 en el intervalo $[20, 180]$ para el rubidio ^{87}Rb . Los resultados de la magnetización izquierda como función de ambas longitudes de dispersión se grafican en una escala de colores en la Figura 7.6. En dicha figura, se representa a escala de colores la magnetización izquierda como función de las longitudes de dispersión a_0 y a_2 . También se traza una línea punteada $a_0 = a_2$, la cual coincide con la frontera entre $m_I < 0,02$ (estado de mezcla) y $m_I > 0,02$ (estado de separación), lo que implica que si $a_0 > a_2$, el sistema estará en un estado de separación, mientras que si $a_0 < a_2$, el sistema estará en un estado de mezcla.

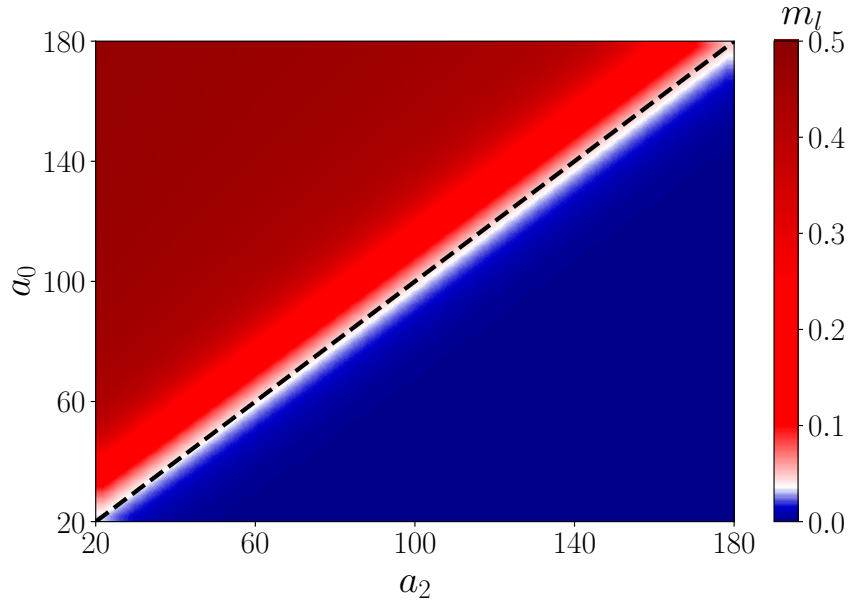


Figura 7.6: Se presenta el comportamiento de la magnetización a escala de colores al variar a_0 y a_2 para un gas compuesto por átomos de ^{87}Rb .

Para generalizar los resultados obtenidos para mezclas de átomos, se emplea la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_1(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \mathfrak{g}_{1,1} |\Psi_1|^2 + \mathfrak{g}_{1,2} |\Psi_2|^2 \right] \Psi_1(\vec{r}, t), \\ i\hbar \frac{\partial \Psi_2(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \mathfrak{g}_{2,2} |\Psi_2|^2 + \mathfrak{g}_{1,2} |\Psi_1|^2 \right] \Psi_2(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (7.226)$$

Si se considera un condensado de dos componentes con masas diferentes e interacciones distintas, se emplea la siguiente relación para las interacciones: $\mathfrak{g}_{i,j} = \frac{2\pi\hbar^2 N a_{i,j}}{\sqrt{2\pi} l_z l_\delta^2 m_r \epsilon}$ donde $a_{i,j}$ es la longitud de dispersión de onda s entre el átomo i y el átomo j con $i, j = 1, 2$, y $m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ es la masa reducida. Para realizar esta generalización se utilizó un “toy model” con átomos con masas y longitudes de dispersión cercanas a las del rubidio, donde $a_{2,2} = 90$ y la $a_{1,1} = 70$. Para esto, se realizaron los siguientes casos.

1. Variando $a_{1,2}$, $a_{1,1}$ y manteniendo $a_{2,2} = 90$ constante:

- Se estudia el comportamiento de la magnetización izquierda ante diversas modificaciones en $a_{1,2}$ y $a_{1,1}$.

2. Variando $a_{1,2}$, $a_{2,2}$ y manteniendo $a_{1,1} = 70$ constante:

- Se estudia el comportamiento de la magnetización izquierda ante diversas modificaciones en $a_{1,2}$ y $a_{2,2}$.

En la Figura 7.7, se grafica el comportamiento de la magnetización izquierda en una escala de colores al variar $a_{1,2}$ y $a_{1,1}$, manteniendo constante $a_{2,2} = 90$. Por otro lado, en la Figura 7.8, se grafica el comportamiento de la magnetización izquierda en una escala de colores, ahora variando $a_{1,2}$ y $a_{2,2}$, manteniendo constante $a_{1,1} = 70$. En ambas figuras (7.7, 7.8), se puede ver una línea punteada en color negro que representa la curva $a_{1,2} = \sqrt{a_{1,1}a_{2,2}}$. Esta línea está cerca de la frontera donde se produce el cambio de un estado de separación a un estado de mezcla. Por ende, se puede observar que para valores de $a_{1,2} > \sqrt{a_{1,1}a_{2,2}}$, se presenta la separación de fases, mientras que para $a_{1,2} < \sqrt{a_{1,1}a_{2,2}}$, se observa mezcla.

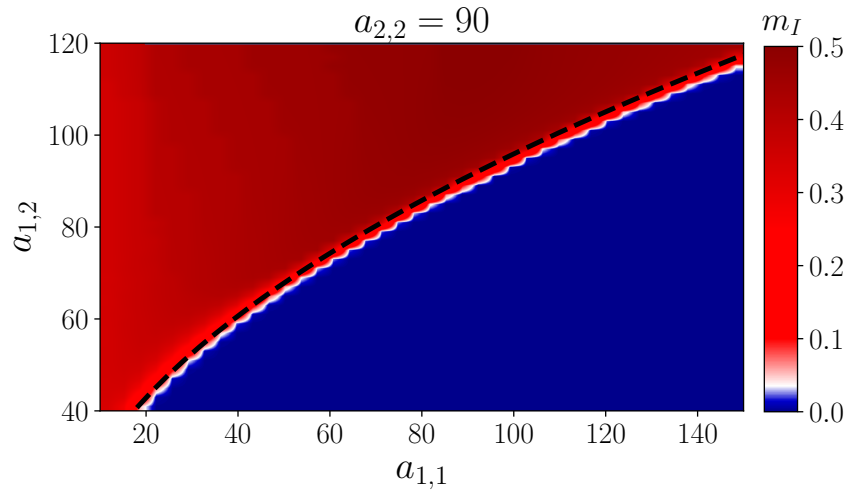


Figura 7.7: Se describe el comportamiento de la magnetización izquierda en escala de colores al variar $a_{1,2}$ y $a_{1,1}$, manteniendo $a_{2,2} = 90$, para un gas compuesto por dos átomos diferentes.

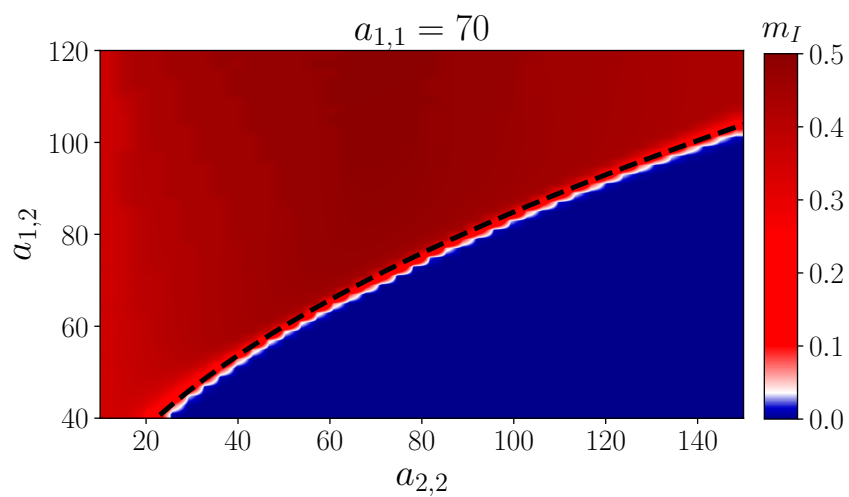


Figura 7.8: Se describe el comportamiento de la magnetización izquierda en escala de colores al variar $a_{1,2}$ y $a_{2,2}$, manteniendo $a_{1,1} = 70$, para un gas compuesto por dos átomos diferentes.

Capítulo 8

Conclusiones

El propósito de esta investigación fue estudiar el fenómeno de separación de fases en un condensado de Bose-Einstein espinorial, centrándose en particular en la influencia de las longitudes de dispersión de onda s en dicho proceso. El interés por esta investigación surge de la diferencia en el comportamiento de los espines de los átomos alcalinos en trampas magnéticas convencionales y trampas ópticas, donde se manifiesta la naturaleza espinorial del condensado de Bose alcalino. Para alcanzar este objetivo, se propuso utilizar un condensado de Bose-Einstein con interacciones de contacto confinado en una red cuadrada bidimensional, compuesto uno de los siguientes por átomos de ^{87}Rb , ^{23}Na , ^{41}K o ^7Li en dos estados hiperfinos, con proyección de espín $+1$ y -1 .

Para abordar este problema, inicialmente, se abordó el formalismo de la segunda cuantización, con un enfoque en la descripción teórica del Hamiltoniano de muchas partículas, seguido de una descripción del potencial de interacción. Dado que los átomos considerados no poseen un momento dipolar magnético considerable, se empleó un modelo de potencial basado en choques entre pares de partículas. Posteriormente, se dedujeron las ecuaciones de Gross-Pitaevskii, tanto en su forma escalar (5.150) como espinorial para varias componentes (5.193). Dado que la ecuación de Gross-Pitaevskii no tiene solución analítica, se procedió a su resolución utilizando métodos numéricos, como la evolución en tiempo imaginario para el estado estacionario, el método de Runge-Kutta de cuarto orden para solucionar la ecuación. El código fue implementado en Python y CUDA para agilizar el tiempo de cómputo. Antes de abordar el tratamiento numérico de la ecuación que describe el condensado, se propuso un potencial de confinamiento para una red cuadrada bidimensional.

Considerando el problema de la separación de fases en un condensado de Bose-Einstein espinorial confinado en una red óptica bidimensional, se realizó un análisis de cómo cambian las constantes de interacción al pasar de resolver el problema en tres dimensiones a dos dimen-

siones. Luego, se llevó a cabo el tratamiento numérico correspondiente para la solución del sistema de ecuaciones que describe el gas. Una vez resueltas numéricamente las ecuaciones, se procedió a estudiar cómo la magnetización mostraba comportamientos distintos al variar los parámetros de dispersión a_0 y a_2 . Tras analizar los resultados obtenidos, se llegó a las siguientes conclusiones:

1. Al modificar las longitudes de dispersión de ondas s , a_0 y a_2 , se puede alterar el estado estacionario del condensado, tanto si dicho estado estacionario implica una mezcla como si implica una separación de fase. En síntesis, se puede afirmar que el estado estacionario del sistema es de separación cuando $a_0 > a_2$ y mezcla cuando $a_0 < a_2$.
2. Se encontró que el estado estacionario de un condensado de Bose-Einstein compuesto por átomos de ^{41}K , ^7Li y ^{87}Rb es un estado de separación, dado que $a_0 > a_2$ para estos átomos. En contraste, el estado estacionario de un condensado de Bose-Einstein compuesto por átomos de ^{23}Na es un estado de mezcla, ya que $a_0 < a_2$.
3. De forma general, si se tiene un condensado de dos átomos (átomo 1 y átomo 2), el sistema estará en un estado de separación si $a_{1,2} > \sqrt{a_{1,1}a_{2,2}}$ y en un estado de mezcla si $a_{1,2} < \sqrt{a_{1,1}a_{2,2}}$.

Referencias

- Bader, P., Blanes, S., y Casas, F. (2013). Solving the schrödinger eigenvalue problem by the imaginary time propagation technique using splitting methods with complex coefficients. *The Journal of chemical physics*, 139 12, 124117. Descargado de <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:13135157>
- Bloch, I., Dalibard, J., y Zwerger, W. (2008, Jul). Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80, 885–964. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885> doi: 10.1103/RevModPhys.80.885
- Bowley, R., y Sánchez, M. (1996). *Introductory statistical mechanics*. Clarendon Press. Descargado de <https://books.google.com.co/books?id=dazvAAAAMAAJ>
- Chen, C.-A., y Hung, C.-L. (2021, Jul). Observation of scale invariance in two-dimensional matter-wave townes solitons. *Phys. Rev. Lett.*, 127, 023604. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.023604> doi: 10.1103/PhysRevLett.127.023604
- Chen, L., Yan, Z., Li, M., y Chen, C. (1998, oct). Bose-einstein condensation of an ideal bose gas trapped in any dimension. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(41), 8289. Descargado de <https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/31/41/003> doi: 10.1088/0305-4470/31/41/003
- Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., y Laloë, F. (2019). *Quantum mechanics, volume 3: Fermions, bosons, photons, correlations, and entanglement*. Wiley. Descargado de <https://books.google.com.co/books?id=B3EoswEACAAJ>
- Gross, C., y Bloch, I. (2017a). Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices. *Science*, 357(6355), 995-1001. Descargado de <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aal3837> doi: 10.1126/science.aal3837
- Gross, C., y Bloch, I. (2017b, 09). Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices. *Science*, 357, 995-1001. doi: 10.1126/science.aal3837
- Hadzibabic, Z. (2008, 03). Berezinskii-kosterlitz-thouless crossover in a trapped atomic gas. , 14004-.
- Hermele, M. (2010). M. hermele, “second quantization, notes for solid state physics ii,” university of colorado (2010).

- Ho, T.-L. (1998, Jul). Spinor bose condensates in optical traps. *Phys. Rev. Lett.*, *81*, 742–745. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.742> doi: 10.1103/PhysRevLett.81.742
- Ho, T.-L., y Shenoy, V. B. (1996, Oct). Binary mixtures of bose condensates of alkali atoms. *Phys. Rev. Lett.*, *77*, 3276–3279. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3276> doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3276
- Kawaguchi, Y., y Ueda, M. (2012, noviembre). Spinor bose–einstein condensates. *Physics Reports*, *520*(5), 253–381. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2012.07.005> doi: 10.1016/j.physrep.2012.07.005
- Klausen, N. N., Bohn, J. L., y Greene, C. H. (2001, Oct). Nature of spinor bose-einstein condensates in rubidium. *Phys. Rev. A*, *64*, 053602. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.64.053602> doi: 10.1103/PhysRevA.64.053602
- Madroñero Carvajal, C. J. (2018). Fases magnéticas en condensados de bose confinadas en redes opticas. *Phys.*. Descargado de <http://sired.udenar.edu.co/id/eprint/7381>
- Morsch, O., y Oberthaler, M. (2006, Feb). Dynamics of bose-einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, *78*, 179–215. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.179> doi: 10.1103/RevModPhys.78.179
- Papp, S. B., Pino, J. M., y Wieman, C. E. (2008, Jul). Tunable miscibility in a dual-species bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, *101*, 040402. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.040402> doi: 10.1103/PhysRevLett.101.040402
- Parker, C. V., Ha, L.-C., y Chin, C. (2013, octubre). Direct observation of effective ferromagnetic domains of cold atoms in a shaken optical lattice. *Nature Physics*, *9*(12), 769–774. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1038/nphys2789> doi: 10.1038/nphys2789
- Peil, S., Porto, J. V., Tolra, B. L., Obrecht, J. M., King, B. E., Subbotin, M., ... Phillips, W. D. (2003, May). Patterned loading of a bose-einstein condensate into an optical lattice. *Phys. Rev. A*, *67*, 051603. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.051603> doi: 10.1103/PhysRevA.67.051603

- Pethick, C. J., y Smith, H. (2008). *Bose–einstein condensation in dilute gases* (2.^a ed.). Cambridge University Press.
- Stamper-Kurn, D. M., Andrews, M. R., Chikkatur, A. P., Inouye, S., Miesner, H.-J., Stenger, J., y Ketterle, W. (1998, Mar). Optical confinement of a bose-einstein condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 80, 2027–2030. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.80.2027> doi: 10.1103/PhysRevLett.80.2027
- Stamper-Kurn, D. M., y Ueda, M. (2013, Jul). Spinor bose gases: Symmetries, magnetism, and quantum dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 85, 1191–1244. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1191> doi: 10.1103/RevModPhys.85.1191
- Tojo, S., Taguchi, Y., Masuyama, Y., Hayashi, T., Saito, H., y Hirano, T. (2010, Sep). Controlling phase separation of binary bose-einstein condensates via mixed-spin-channel feshbach resonance. *Phys. Rev. A*, 82, 033609. Descargado de <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.82.033609> doi: 10.1103/PhysRevA.82.033609
- Zamora-Zamora, R., Domínguez-Castro, G. A., Trallero-Giner, C., Paredes, R., y Romero-Rochín, V. (2019, aug). Validity of gross–pitaevskii solutions of harmonically confined bec gases in reduced dimensions. *Journal of Physics Communications*, 3(8), 085003. Descargado de <https://dx.doi.org/10.1088/2399-6528/ab360f> doi: 10.1088/2399-6528/ab360f

Apéndice A

Condensación de un gas ideal de Bose-Einstein

El sistema considerado es un gas ideal compuesto por N partículas dentro de una caja de lado L y volumen $V = L^3$. El Hamiltoniano que describe este sistema es:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{\mathbf{P}}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ext}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\text{A.227})$$

donde $\hat{\mathbf{P}}_i$ es el operador de momento de la i -ésima partícula, mientras m es la masa de la partícula. Suponer condiciones de contorno periódicas, las funciones propias de una sola partícula del Hamiltoniano son los estados propios de impulso. En el espacio real, estos estados propios se expresan como (4.8):

$$\phi_{\mathbf{P}} = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \chi | \sigma \rangle, \quad (\text{A.228})$$

donde los números cuánticos de momento pueden tomar los valores, ver (4.7);

$$\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}. \quad (\text{A.229})$$

Además, la energía cinética está dada por

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (\text{A.230})$$

Para la completa caracterización de los estados de una sola partícula, se debe tener en cuenta el espín. Este es entero, dado que se trabaja con bosones. El número cuántico σ para la componente z del espín tiene $2m+1$ valores posibles. Al combinar los dos números cuánticos $k = (\mathbf{k}, \sigma)$ se obtienen los estados propios de energía completos.

$$|k\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle |\sigma\rangle \quad (\text{A.231})$$

Los números cuánticos de una sola partícula se siguen denotando por k , y el autovalor correspondiente al autoestado de energía k se denota por ϵ_k , aunque ya no es necesario que sea el mismo que (A.230). Estos estados forman las bases de los estados de las N partículas bosónicas, representados como $|k_1, k_2, \dots, k_N\rangle \longrightarrow |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$, indicando la cantidad de partículas n_k en el estado $|k\rangle$. Para un estado de N partículas, la suma de todos los n_k satisface la igualdad $N = \sum_k n_k$, y los autovalores de energía de este estado son:

$$E(\{n_k\}) = \sum_k \epsilon_k n_k. \quad (\text{A.232})$$

Ahora calculamos la función gran partición,

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}^{N=\sum_k n_k} e^{-\beta[E(\{n_k\}) - \mu N]}. \quad (\text{A.233})$$

Se observa que la suma sobre $\{n_k\}$ está limitada a los casos en que $N = \sum_k n_k$. Posteriormente, el resultado se suma sobre todos los valores de N . Al introducir el término de la fugacidad del sistema $\lambda \equiv e^{\beta\mu}$ y cambiar la suma a términos de $\{n_k\}$ se puede simplificar la doble suma sobre $\{n_k\}$ de la siguiente manera: $\{n_k\}$, así

$$\sum_{\{n_k\}} \dots = \prod_k \sum_{n_k} \dots$$

Esto se refiere a la suma múltiple sobre todos los números de ocupación, donde cada número de ocupación $\{n_k\}$ toma todos los valores permitidos $0, 1, 2, \dots$ para bosones. Por lo tanto, se tendrá:

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}^{N=\sum_k n_k} e^{-\beta[E(\{n_k\}) - \mu N]}, \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_k\}}^{N=\sum_k n_k} \lambda^N e^{-\beta E(\{n_k\})}, \\ &= \sum_{n_0, n_1, n_2, \dots} \lambda^{\sum_k n_k} e^{-\beta \sum_k \epsilon_k n_k}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \lambda^{n_0+n_1+n_2\dots} e^{-\beta\epsilon_0 n_0 - \beta\epsilon_1 n_1 - \beta\epsilon_2 n_2 \dots}, \\
 &= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots (\lambda^{n_0} e^{-\beta\epsilon_0 n_0}) (\lambda^{n_1} e^{-\beta\epsilon_1 n_1}) (\lambda^{n_2} e^{-\beta\epsilon_2 n_2}) \dots, \\
 &= \sum_{n_0} (\lambda^{n_0} e^{-\beta\epsilon_0 n_0}) \sum_{n_1} (\lambda^{n_1} e^{-\beta\epsilon_1 n_1}) \sum_{n_2} (\lambda^{n_2} e^{-\beta\epsilon_2 n_2}) \dots, \\
 \Xi &= \prod_k \sum_{n_k}^{n_{max}} (\lambda^{n_k} e^{-\beta\epsilon_k n_k}).
 \end{aligned}$$

Es decir, se encuentra que:

$$\Xi = \prod_k \sum_{n_k}^{n_{max}} (\lambda^{n_k} e^{-\beta\epsilon_k n_k}) = \prod_k \sum_{n_k}^{n_{max}} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)n_k}, \quad (\text{A.234})$$

siendo n_{max} el número máximo de ocupación de un determinado estado k de una partícula, y dado que se va a trabajar con bosones, se tiene que $n_{max} = \infty$. Además, la serie converge puesto que $e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \ll 1$, obteniendo así la forma final de la función de partición:

$$\Xi = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}}. \quad (\text{A.235})$$

Sabiendo que el gran potencial termodinámico está dado por: $\Omega = -k_\beta T \ln \Xi$ [Bowley y Sánchez \(1996\)](#),

$$\Omega = k_\beta T \sum_k \ln (1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}),$$

donde es posible determinar las propiedades termodinámicas a partir del gran potencial, tales como la entropía, la presión y el número de partículas [Bowley y Sánchez \(1996\)](#),

$$S \equiv - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu}, \quad \mathcal{P} \equiv - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu}, \quad N \equiv - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V}. \quad (\text{A.236})$$

Termodinámica de un gas ideal Bose-Einstein

Ahora se definirá la función distribución $n(\epsilon_r)$, la cual se puede interpretar como el número promedio de partículas en el estado $|r\rangle$. Por el postulado de Gibbs y haciendo uso de la expresión (A.236), se encuentra que el número promedio de partículas es:

$$N \equiv - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right) = \sum_k n(\epsilon_k), \quad (\text{A.237})$$

donde se ha introducido:

$$n(\epsilon_k) \equiv \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}; \quad (\text{A.238})$$

Estas también se conocen como las funciones de distribución de Bose. Si se desea demostrar que $n(\epsilon_r)$ representa el número de ocupación promedio de los estados $|r\rangle$, se puede calcular el valor promedio de n_r . Para ello, se emplea la definición del valor promedio de un operador $\hat{A}$, dada por:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_G \hat{A}), \quad (\text{A.239})$$

donde la función Tr se entiende como la traza y $\hat{\rho}_G$ es la matriz de densidad, de modo que:

$$\begin{aligned} \langle n_r \rangle &= \text{Tr}(\hat{\rho}_G n_r) = \frac{\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta \sum_k n_k (\epsilon_k - \mu)} n_r}{\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta \sum_k n_k (\epsilon_k - \mu)}} = \frac{\left[\prod_{k \neq r} \sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) n_k} \right] \sum_{n_r} e^{-\beta(\epsilon_r - \mu) n_r} n_r}{\left[\prod_{k \neq r} \sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) n_k} \right] \sum_{n_r} e^{-\beta(\epsilon_r - \mu) n_r}} \\ &= \frac{\sum_{n_r} e^{-\beta(\epsilon_r - \mu) n_r} n_r}{\sum_{n_r} e^{-\beta(\epsilon_r - \mu) n_r}} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[\ln \sum_n e^{-x n} \right]_{x=\beta(\epsilon_r - \mu)} = - \frac{\partial}{\partial x} [-\ln(1 - e^{-x})]_{x=\beta(\epsilon_r - \mu)} \\ &= \left[\frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \right]_{x=\beta(\epsilon_r - \mu)}, \end{aligned}$$

y por tanto,

$$\langle n_r \rangle = n(\epsilon_r) \quad (\text{A.240})$$

Lo que demuestra la exactitud de su afirmación. Ahora se vuelve al cálculo de las cantidades termodinámicas. Para la energía interna, partiendo de (A.236) y aplicando $\frac{\partial}{\partial \beta}(\beta\Omega) = E - \mu N$ [Bowley y Sánchez \(1996\)](#), se encuentra que:

$$\begin{aligned} E &= \mu N + \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta\Omega) \\ &= \mu N + \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\sum_r \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)}) \right] \\ &= \mu N + \sum_r (\epsilon_r - \mu) \frac{1}{e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)} - 1} \end{aligned}$$

obteniendo,

$$E = \sum_r \epsilon_k n(\epsilon_k), \quad (\text{A.241})$$

donde esta expresión representa la energía en función de la función de distribución.

Ecuacion de Estado

De acuerdo con (A.229), en cualquier sistema de tamaño macroscópico, el espacio entre los niveles sucesivos de impulso es extremadamente pequeño en comparación con el impulso térmico característico $(2mk_\beta T)^{1/2}$:

$$\frac{\Delta}{(2mk_\beta T)^{1/2}} = \frac{P_{i,\mathcal{M}} - P_{i,\mathcal{M}-1}}{(2mk_\beta T)^{1/2}} = \frac{2\pi\hbar}{L(2mk_\beta T)^{1/2}} \ll 1. \quad (\text{A.242})$$

Dado el gran tamaño de L y la pequeñez de $\hbar$, este criterio se satisface adecuadamente incluso a bajas temperaturas accesibles. El momento es prácticamente una variable continua. Por lo tanto, las sumas sobre las variables discretas $\mathcal{M}_i$ se pueden reemplazar por integrales sobre la variable continua P_i , siempre que se tenga en cuenta el número gdP_i de estados de momento en el intervalo dP_i . El procedimiento para esta transición es el siguiente:

Nota: No se debe confundir P , que representa la magnitud de la cantidad de movimiento, con $\mathcal{P}$, que representa la presión. La notación hace la distinción entre ambas.

$$\begin{aligned}\sum_P f(P) &= g \sum_{\mathbf{P}} f(\mathbf{P}) = g \frac{1}{\Delta^3} \sum_{\mathbf{P}} \Delta^3 f(\mathbf{P}) \\ &\rightarrow g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3P f(\mathbf{P}) = g \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int dP^3 f(\mathbf{P}),\end{aligned}\quad (\text{A.243})$$

con el factor de degeneración $g = 2\mathcal{M} + 1$, resultado de la independencia del espín de la energía de una sola partícula ϵ_P según el Hamiltoniano de partículas libres (A.227). Para el número promedio de partículas de (A.237), se obtiene:

$$\begin{aligned}N &= \frac{Vg}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3P n(\epsilon_{\mathbf{P}}) = \frac{Vg}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dP P^2 n(\epsilon_{\mathbf{P}}) \\ &= \frac{gVm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{d\epsilon\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1},\end{aligned}\quad (\text{A.244})$$

donde hemos introducido $\epsilon = \frac{P^2}{2m}$ como variable de integración. Además definimos el volumen específico como:

$$v = \frac{V}{N}, \quad (\text{A.245})$$

y se sustituye $x = \beta\epsilon$. Además, Λ representa la longitud de onda térmica de Broglie¹

$$\Lambda = \frac{h}{(2\pi mk_B T)^{1/2}} \quad \text{y} \quad \lambda = e^{\beta\mu}, \quad (\text{A.246})$$

finalmente de (A.244)

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{\Lambda^3} \frac{2g}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x \lambda^{-1} - 1} = \frac{g}{\Lambda^3} g_{3/2}(\lambda). \quad (\text{A.247})$$

En la expresión anterior, se ha introducido la función generalizada, la cual está definida por:

$$g_y(\lambda) \equiv \frac{1}{\Gamma(y)} \int_0^\infty dx \frac{x^{y-1}}{e^x \lambda^{-1} - 1}, \quad (\text{A.248})$$

¹La longitud térmica mide la incertidumbre de la posición debido a la distribución del momento térmico de un gas a la temperatura T . Esta aumenta con la reducción de la temperatura T . Los efectos de la estadística cuántica comienzan a ser notables cuando Λ se hace comparable con el espacio interatómico.

donde $g_y(\lambda)$ se denomina función de Bose-Einstein.

De manera similar, a partir de (A.244), se encuentra:

$$\begin{aligned}\Omega &= v \frac{Vg}{(2\pi\hbar)^3\beta} \int d^3P \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_P - \mu)}), \\ &= v \frac{Vgm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3\beta} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_P - \mu)}),\end{aligned}\tag{A.249}$$

que, al integrar por partes, se obtiene:

$$\Omega = -\mathcal{P}V = -\frac{2}{3} \frac{Vgm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} = -\frac{gVk_\beta T}{\Lambda^3} g_{5/2}(\lambda),\tag{A.250}$$

donde las líneas superiores se mantienen para los bosones. La expresión $\Omega = -\mathcal{P}V$, válida para sistemas homogéneos, fue utilizada. A partir de (A.241), se obtiene la energía interna:

$$E = \frac{Vg}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3P \epsilon_{\mathbf{P}} n(\epsilon_{\mathbf{P}}) = \frac{Vgm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}d\epsilon}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1}.\tag{A.251}$$

La comparación con (A.250) produce, notablemente, la misma relación

$$\mathcal{P}V = \frac{2}{3}E.\tag{A.252}$$

Se derivan relaciones generales adicionales de la homogeneidad de Ω en T y μ . A partir de (A.250), (A.244) y (A.248), se obtienen:

$$\begin{aligned}\mathcal{P} &= -\frac{\Omega}{V} = -T^{5/2}\varphi\left(\frac{\mu}{T}\right), \\ N &= VT^{3/2}n\left(\frac{\mu}{T}\right), \\ S &= -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu} = VT^{3/2}s\left(\frac{\mu}{T}\right), \\ \frac{S}{N} &= \frac{s(\mu/T)}{n(\mu/T)}.\end{aligned}\tag{A.253}$$

Utilizando los resultados anteriores, se puede derivar fácilmente la ecuación adiabática. La condición $S = cte$ y $N = cte$, junto con las ecuaciones previas, llevan a $\mu/T = cte$, $VT^{3/2} = cte$, $\mathcal{P}V^{-5/2} = cte$ y finalmente:

$$\mathcal{P}V^{5/3} = cte. \quad (\text{A.254})$$

límite clásico $\lambda = e^{\mu/k_\beta T} \ll 1$

Primero se formula la ecuación de estado en el límite cuasi-clásico. Para ello, se expande la función g generalizada, definida en (A.248), como una serie de potencias en λ

$$g_y(\lambda) \equiv \frac{1}{\Gamma(y)} \int_0^\infty dx x^{y-1} e^{-x} \lambda \sum_{k'=0}^\infty e^{-xk'} \lambda^{k'} = \sum_{k=1}^\infty \frac{\lambda^k}{k^y}, \quad (\text{A.255})$$

Luego, la ecuación (A.247) toma la forma:

$$\frac{\Lambda^3}{v} = g \sum_{k=1}^\infty \frac{\lambda^k}{k^{3/2}} = g \left(\lambda + \frac{\lambda^2}{2^{3/2}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \right). \quad (\text{A.256})$$

Esta ecuación puede resolverse iterativamente para λ :

$$\lambda = \frac{\Lambda^3}{gv} - \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\Lambda^3}{gv} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\Lambda^3}{v} \right)^3 \right). \quad (\text{A.257})$$

Al insertar la ecuación en la serie para Ω en (A.250) y (A.255), se obtiene:

$$\Omega = -\frac{gVk_\beta T}{\Lambda^3} \left(\lambda + \frac{\lambda^3}{2^{5/2}} + \mathcal{O} \right), \quad (\text{A.258})$$

se puede eliminar μ en favor de N y obtener así la ecuación de estado.

$$\mathcal{P}V = -\Omega = Nk_\beta T \left(1 - \frac{l\Lambda^3}{2^{5/2}gv} + \mathcal{O} \left(\left(\frac{\Lambda^3}{v} \right)^2 \right) \right) \quad (\text{A.259})$$

Haciendo uso de $\frac{\Lambda^3}{vg} \ll 1$, se obtiene:

$$\mu = k_{\beta}T \ln(\lambda) = k_{\beta}T \left[\ln \left(\frac{\Lambda^3}{gv} \right) - \frac{\Lambda^3}{2^{3/2}gv} \dots \right]. \quad (\text{A.260})$$

Es decir, $\mu < 0$. Adicionalmente, para la energía libre de Helmholtz $A = \Omega + \mu N$, a partir de las ecuaciones (A.259) y (A.260), se obtiene:

$$A = A_{clas} - v k_{\beta}T \frac{N \Lambda^3}{2^{5/2}gv}, \quad (\text{A.261})$$

donde

$$A_{clas} = N k_{\beta}T \left(\ln \left(\frac{\Lambda^3}{gv} \right) - 1 \right), \quad (\text{A.262})$$

siendo esta la energía libre del gas ideal clásico.

Condensación de Bose-Einstein en un gas homogéneo

Veamos cómo se comporta un gas de Bose ideal no relativista con espín $s = 0$, a bajas temperaturas. En este caso, la degenerancia es $g = 1$ y la energía está dada por la expresión

$$\epsilon_{\mathbf{P}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}. \quad (\text{A.263})$$

En su estado fundamental, todos los bosones no interactuantes ocupan el estado de partícula única con la energía más baja; por lo tanto, su comportamiento a baja temperatura es significativamente diferente del de los fermiones. Entre la fase de alta temperatura, donde los bosones se distribuyen a lo largo de todo el espectro de valores de momento, correspondiente a la función de distribución de Bose, y la fase en la que el estado $P = 0$ se ocupa macroscópicamente (a $T = 0$, todas las partículas están en este estado), se produce una transición de fase. Esta transición, conocida como la condensación de Bose-Einstein de un gas de Bose ideal, fue predicha por Einstein basándose en las consideraciones estadísticas de Bose, casi setenta años antes de ser observada experimentalmente. En primer lugar, se refiere a los resultados

en la ecuación (A.235), donde se encontró la densidad de partículas, es decir, el recíproco del volumen específico, en la ecuación (A.247):

$$\frac{\Lambda^3}{v} = g_{3/2}(\lambda) \quad \text{con} \quad \Lambda = \hbar \sqrt{\frac{2\pi}{mk_\beta T}}, \quad (\text{A.264})$$

y, usando (A.255),

$$g_{3/2}(\lambda) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{e^x \lambda^{-1} - 1} = \sum_{k=1}^\infty \frac{\lambda^{3/2}}{k^{3/2}}. \quad (\text{A.265})$$

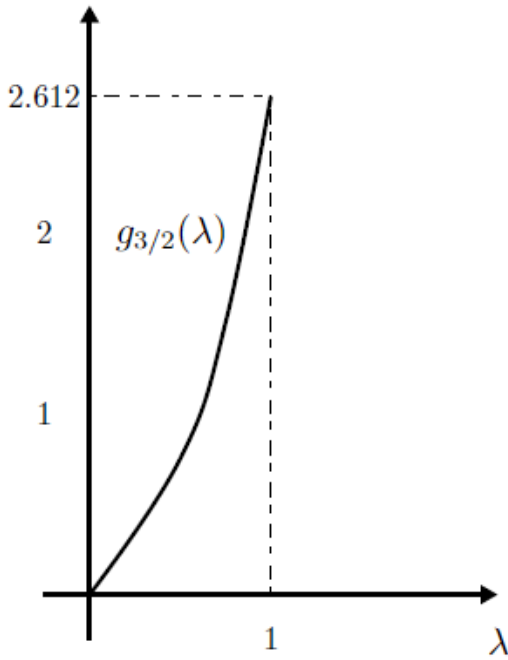
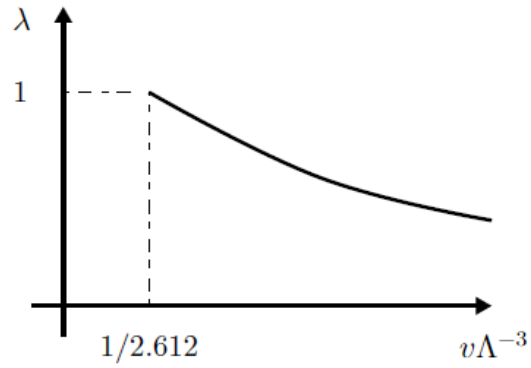
Para asegurar que $n(\epsilon_p) \geq 0$ para cada valor de P , se requiere que $\mu < 0$ para los bosones y, para un espectro de energía arbitrario, que $\mu < \text{mini}(\epsilon_P)$. La fugacidad $\lambda = e^{\frac{\mu}{k_\beta T}}$ está entonces limitada a $\lambda \leq 1$. El valor máximo de la función $g_{3/2}(1)$ Figura (A.1) es luego dado por $g_{3/2}(1) = 2,612$. A continuación, se considera el número de partículas y el volumen, y por lo tanto, el volumen específico v , para fijarlo a valores dados. Según la ecuación (A.264), se puede calcular λ en función de T , o más convenientemente, $v\Lambda^{-3}$. Al bajar la temperatura, $\frac{v}{\Lambda^3}$ disminuye y, por lo tanto, λ aumenta, hasta que finalmente, en $\frac{v}{\Lambda^3} = \frac{1}{2,612}$, alcanza su valor máximo $\lambda = 1$ Figura (A.2). Esto define una temperatura característica.

$$k_\beta T_c(v) = \frac{2\pi\hbar^2}{m(2,612v)^{2/3}}. \quad (\text{A.266})$$

Cuando λ se aproxima a 1, es necesario ser más cuidadoso al tomar el límite $\sum_{\mathbf{P}} \rightarrow \int d^3P$ utilizando las ecuaciones (A.243) y (A.244). Esto también se indica por el hecho de que la ecuación (A.264) implicaría que, para $\lambda = 1$, a temperaturas inferiores a $T_c(v)$, la densidad $1/v$ debe disminuir al bajar la temperatura. Según la ecuación (A.264), parece que ya no hay suficiente espacio para todas las partículas. Claramente, se debe tratar el término ($\mathbf{P} = 0$) en la suma de la ecuación (A.237), que diverge cuando $\Lambda \rightarrow 1$, de manera separada:

$$N = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1} + \sum_{\mathbf{P} \neq 0} n(\epsilon_{\mathbf{P}}) = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1} + \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3P n(\epsilon_{\mathbf{P}}). \quad (\text{A.267})$$

Para los bosones, esta modificación es relevante únicamente cuando $T < T_c(v)$, lo que lleva a la ocupación completa del estado ($\mathbf{P} = 0$). De este modo, en lugar de la ecuación (A.264), se obtiene la siguiente expresión para los bosones:


 Figura A.1: La función $g_{3/2}(\lambda)$

 Figura A.2: La fugacidad λ como función de $v\Lambda^{-3}$.

$$N = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1} + N \frac{v}{\lambda} g_{3/2}(\lambda). \quad (\text{A.268})$$

Además, utilizando las ecuaciones (A.266) y $\Lambda^3 = \left(\frac{2\pi\hbar}{mk_\beta T} \right)^{3/2}$, se obtiene:

$$v = \left(\frac{2\pi\hbar}{mk_\beta T_c(v)} \right)^{3/2} \frac{1}{g_{3/2}(1)} \implies \frac{v}{\Lambda^3} = \left(\frac{T}{T_c(v)} \right)^{3/2} \frac{1}{g_{3/2}(1)}. \quad (\text{A.269})$$

Así, para el número total de partículas N , se tiene:

$$N = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1} + N \left(\frac{T}{T_c(v)} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(\lambda)}{g_{3/2}(1)}. \quad (\text{A.270})$$

El número total de partículas N es, por lo tanto, la suma del número de partículas en el estado fundamental

$$N_0 = \frac{1}{\lambda^{-1} - 1}. \quad (\text{A.271})$$

y las partículas distribuidas en los estados excitados:

$$N' = N \left(\frac{T}{T_c(v)} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(\lambda)}{g_{3/2}(1)}. \quad (\text{A.272})$$

Para $T > T_c(v)$, la ecuación (A.270) produce un valor para λ tal que $\lambda < 1$. El primer término en el lado derecho de la ecuación (A.266) es, por lo tanto, finito y puede ser despreciado en comparación con N . Las condiciones iniciales se mantienen en este caso; en particular, λ se sigue determinando a partir de la ecuación (A.266), que:

$$g_{3/2}(\lambda) = 2,612 \left(\frac{T_c(v)}{T} \right)^{3/2} \quad \text{para } T > T_c(v). \quad (\text{A.273})$$

Para $T > T_c(v)$, según la ecuación (A.266), $\lambda = 1 - \mathcal{O}(1/N)$. Esto sugiere que todas las partículas que ya no están en estados excitados pueden encontrar suficiente espacio para entrar en el estado fundamental. Cuando λ está muy cerca de 1, se puede establecer $\lambda = 1$ en el segundo término y obtener:

$$N_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_c(v)} \right)^{3/2} \right). \quad (\text{A.274})$$

Se evidencia en la ecuación (A.274) la condensación, donde N_0 representa el número de partículas en el estado base. Si $T < T_c(v)$, N_0 es del orden de N , lo que implica una ocupación macroscópica del estado base. Este fenómeno se conoce como la condensación de Bose-Einstein Figura (A.3). Por debajo de $T_c(v)$, el estado fundamental $\mathbf{P} = 0$ se ocupa macroscópicamente, lo que implica que una fracción significativa de las partículas del sistema se encuentran en este estado de mínima energía.

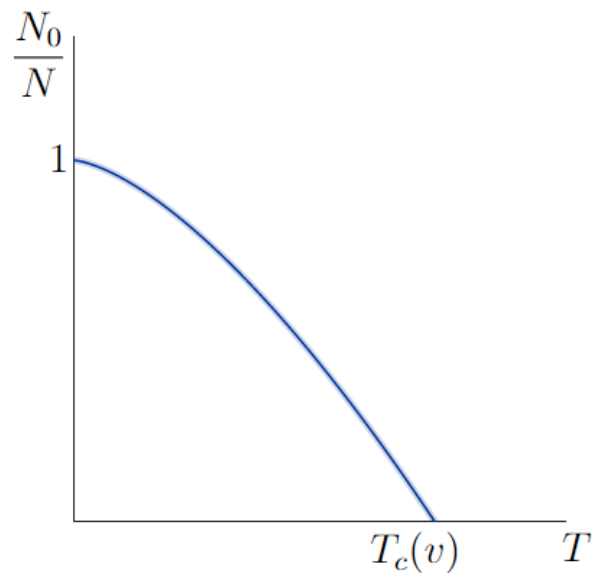


Figura A.3: La fracción condensada N_0/N como función de la temperatura describe la condensación de Bose-Einstein. Para $T \leq T_c(v)$, esta fracción es diferente de cero, aumentando abruptamente a medida que la temperatura disminuye, y tendiendo a 1 a medida que $T = 0$ se acerca a cero. Sin embargo, para $T \geq T_c(v)$, esta fracción es cero.

Apéndice B

Primera Cuantización

B.1. Cálculo de términos para Primera Cuantización

Se procederá al cálculo de los diferentes términos de V'_1 y V'_2 dentro del contexto de la primera cuantización, teniendo en cuenta la ecuación (4.22), y examinando los diversos casos presentados en las ecuaciones (4.25) y (4.26), respectivamente.

Cálculo de términos para V'_2

Se aborda el otro caso de V_1 , es decir, se calcula el escenario donde aparece el término $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle$. Entonces, para este caso, la ecuación (4.23) adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \quad (B.275) \\ & \times \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle. \end{aligned}$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_2, k_3.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.275), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_2} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 1, n_{k_2} - 1, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_3} y n'_{k_3} , entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1}, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 2, n'_{k_4}, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que :

$$n'_{k_1} = n_{k_1} - 1, \quad n'_{k_2} = n_{k_2} - 1, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 2.$$

Por otro lado, la suma $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \quad \text{y} \quad k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.275) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)! (n_{k_2} - 1)! (n_{k_3} + 2)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \sum_{perm} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t), \end{aligned} \quad (\text{B.276})$$

donde las sumas $\sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3}$ se extienden desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$, representa el número total de permutaciones:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)! (n_{k_2} - 1)! (n_{k_3} + 2)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.277})$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el otro término de los diversos casos de V_1 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle$, se identifica que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_3} + 2)} \times \\ & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.278})$$

Aplicando el mismo procedimiento, se examina el otro caso de V_2 , es decir, se calcula cuando aparece el término $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle$. Por lo tanto, para este caso, la ecuación (4.23) adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \quad (B.279) \\ & \times \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle. \end{aligned}$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_2.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.279), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_2} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 1, n_{k_2} - 1, n_{k_3}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_1} y n'_{k_2} de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1} - 2, n'_{k_2}, n'_{k_3}, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1} + 1, \quad n'_{k_2} = n_{k_2} - 1.$$

Por otro lado, la suma $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \quad \text{y} \quad k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.279) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
& \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} + 1)!(n_{k_2} - 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\
& \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \sum_{perm} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} + 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_\infty)}(t),
\end{aligned} \tag{B.280}$$

donde las sumas $\sum_{k_1 \neq k_2}$ se extienden desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$, representa el número total de permutaciones:

$$\begin{aligned}
& \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} + 1)!(n_{k_2} - 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\
& \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} + 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{B.281}$$

Al simplificar los factores, se obtiene el otro término de los diversos casos de V_1 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle$, se identifica,

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} (n_{k_1} + 1) n_{k_2}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} + 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{B.282}$$

Ahora para el ultimo caso de V_1 , es decir, calculemos cuando aparece el término $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle$. Por lo tanto, para este caso, la ecuación (4.23) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\
& \times \underbrace{\int \int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \\
& \times \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle.
\end{aligned} \tag{B.283}$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_2, k_3.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.283), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_2} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 1, n_{k_2} - 1, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_1} y n'_{k_3} de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4}, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1}, \quad n'_{k_2} = n_{k_2} - 1, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 1.$$

Por otro lado, la suma $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \quad \text{y} \quad k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.283) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots n_{k_1}! (n_{k_2} - 1)! (n_{k_3} + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \sum_{perm} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t), \end{aligned} \quad (\text{B.284})$$

donde las sumas $\sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3}$ se extienden desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$, representa el número total de permutaciones.

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots n_{k_1}! (n_{k_2} - 1)! (n_{k_3} + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} n_{k_2} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.285})$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el otro término de los diversos casos de V_1 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle$, se identifica:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{B.286}$$

Finalmente, se suman todas las contribuciones encontradas en (4.30), (B.278), (B.282) y (B.286), las cuales se definen como V'_1 :

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_3} + 2)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 2, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} (n_{k_1} + 1) n_{k_2}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} + 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{B.287}$$

Cálculo de términos para V'_2

Para el primer caso de V_2 , donde se calcula el $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle$, la ecuación (4.23) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \\ & \times \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.288})$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_3, k_4.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.288), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_1} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 2, n_{k_2}, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_3} y n'_{k_4} de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1}, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1} - 2, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 1, \quad n'_{k_4} = n_{k_4} + 1.$$

Por otro lado, la suma $\underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j}$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \quad \text{y} \quad k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.288) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 2)!(n_{k_3} + 1)!(k_4 + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \sum_{perm} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (B.289)$$

En esta expresión, las sumas $\sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4}$ abarcan desde cero hasta el infinito, mientras que la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$ representa el número total de permutaciones.

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 2)!(n_{k_3} + 1)!(k_4 + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (B.290)$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el primer término de los diversos casos de V_2 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle$, se identifica,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} (n_{k_1} - 1) (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\ & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (B.291)$$

Aplicando el mismo procedimiento, examinemos el otro caso de V_2 , es decir, calculemos cuando aparece el término $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle$. Por lo tanto, para este caso, la ecuación (4.23) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \\ & \times \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle. \end{aligned} \quad (B.292)$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_3.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.292), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_3} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 2, n_{k_2}, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_3} y n'_{k_1} de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1}, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 2, n'_{k_4}, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1} - 2, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 2.$$

Por otro lado, la suma $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \quad \text{y} \quad k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.292) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 = k_3} \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 2)! (n_{k_3} + 2)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \sum_{perm} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 2, \dots, n_\infty)}(t), \end{aligned} \quad (\text{B.293})$$

donde las sumas $\sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 = k_3}$ se extienden desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$ representa el número total de permutaciones.

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 = k_3} \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 2)! (n_{k_3} + 2)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 2, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.294})$$

Al simplificar los factores, se obtiene el primer término de los diversos casos de V_2 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle$, se identifica:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)(n_{k_3} + 2)} \times \\ & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-2, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.295})$$

Ahora, se examina el otro caso de V_2 , es decir, calcular cuando aparece el término $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle$. Por lo tanto, para este caso, la ecuación (4.23) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n'_0! n'_1! \dots n'_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\ & \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \\ & \times \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.296})$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1, k_3.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.296), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_1} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_{k_1} - 2, n_{k_2}, n_{k_3}, n_{k_4}, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n'_{k_1} y n'_{k_3} de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n'_0, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2}, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4}, \dots, n'_\infty).$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n'_{k_1} = n_{k_1} - 1, \quad n'_{k_3} = n_{k_3} + 1.$$

Por otro lado, la suma $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \text{ y } k_1 = k_2 \implies n_{k_1}(n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.296) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_3} \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)! (n_{k_3} + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \sum_{perm} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t), \end{aligned} \quad (\text{B.297})$$

donde las sumas $\sum_{k_1 \neq k_3}$ se extienden desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!}$ representa el número total de permutaciones.

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_3} \sqrt{\frac{n_0! \dots (n_{k_1} - 1)! (n_{k_3} + 1)! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\ & \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_\infty!} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.298})$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el primer término de los diversos casos de V_2 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle$, se identifica:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} (n_{k_1} - 1) (n_{k_1} - 1) (n_{k_3} + 1)} \times \\ & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t). \end{aligned} \quad (\text{B.299})$$

Ahora, para el último caso de V_2 , es decir, al calcular cuando aparece el término $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle$, la ecuación (4.23) adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\{n'\}} C_{\{n'\}}(t) \sqrt{\frac{n_0'! n_1'! \dots n_\infty'!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j} \sum_{perm'} \sum_{perm} \times \\
& \times \underbrace{\int \dots \int dr_1 dr_2 \dots dr_N}_{\neq \int \int dr_i dr_j} \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \dots \phi_\gamma^*(r_N) \phi_{\alpha'}(r_1) \phi_{\beta'}(r_2) \dots \phi_{\gamma'}(r_N) \times \quad (B.300) \\
& \times \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle.
\end{aligned}$$

Al dividir las integrales de esta manera, las primeras integrales n_α deben ser iguales a las $n_{\alpha'}$ para evitar que se anulen, dado que las funciones ϕ_k son ortonormales cuando

$$\alpha \neq k_1.$$

Sin embargo, como se aprecia en la ecuación (B.300), al separar las integrales, es necesario quitar un n_{k_1} y n_{k_1} de las $\{n\}$ dadas, entonces

$$\{n\} = (n_0, n_1, n_{k_1} - 2, \dots, n_\infty),$$

de igual manera se debe quitar un n_{k_1}' y n_{k_1}' de $\{n'\}$, entonces

$$\{n'\} = (n_0', n_1', n_{k_1}' - 2, \dots, n_\infty').$$

Por lo tanto, para que las primeras integrales sean diferentes de cero, se debe cumplir que:

$$n_{k_1}' = n_{k_1}.$$

Por otro lado, la suma $\underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N}_{i \neq j}$ tiene dos casos independientes de la permutación los cuales son:

$$k_1 \neq k_2 \implies n_{k_1} n_{k_2} \text{ y } k_1 = k_2 \implies n_{k_1} (n_{k_1} - 1).$$

Teniendo en cuenta todos estos elementos, la ecuación (B.300) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
& \sum_{k_1} \sqrt{\frac{n_0! \dots n_{k_1}! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0! n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \times \\
& \times \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \sum_{perm} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t), \quad (B.301)
\end{aligned}$$

donde la suma $\sum_{k_1}$ abarca desde cero hasta el infinito, y la suma sobre las permutaciones $\sum_{perm} = \frac{N!}{n_0!n_1!\dots n_\infty!}$, representa el número total de permutaciones,

$$\sum_{k_1} \sqrt{\frac{n_0! \dots n_{k_1}! \dots n_\infty!}{N!}} \sqrt{\frac{n_0!n_1! \dots n_\infty!}{N!}} \frac{1}{2} n_{k_1} (n_{k_1} - 1) \frac{N!}{n_0!n_1! \dots n_\infty!} \times$$

$$\times \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t). \quad (B.302)$$

Al simplificar los factores, se puede obtener el primer término de los diversos casos de V_2 . Específicamente, para el caso $\langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle$, se identifica que,

$$\frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{(n_{k_1} - 1)(n_{k_1} - 1)n_{k_1}n_{k_1}} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t). \quad (B.303)$$

Finalmente, se suman todas las contribuciones encontradas en (B.291), (B.295), (B.299) y (B.303), definidas como V_2' :

$$V_2' = \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_4} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)(n_{k_4} + 1)} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)(n_{k_3} + 2)} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 2, \dots, n_\infty)}(t) \quad (B.304)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{(n_{k_1} - 1)(n_{k_1} - 1)n_{k_1}n_{k_1}} \times$$

$$\times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t)$$

Apéndice C

Segunda Cuantización

C.1. Cálculo de términos para Segunda Cuantización

Para calcular los distintos términos de V'_1 según la ecuación (4.80) y los términos correspondientes de V'_2 como indica la ecuación (4.80), se aplicará la acción de cada uno de los operadores de aniquilación y creación en los diferentes “sándwich” de manera simultánea.

Cálculo de términos para V'_1

Por consiguiente, al utilizar las definiciones (4.55) y (4.56) y aplicar el primer operador a los distintos términos, se tiene:

$$\begin{aligned}
 V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
 & \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
 & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
 & \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
 & + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
 & \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \underbrace{(\hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty)}_{=\sqrt{n'_{k_1}} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}-1, \dots, n'_\infty} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
 & + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
 & \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty} \rangle C_{\{n'\}}(t).
 \end{aligned}$$

Al aplicar el primer operador sobre el ket, se observa que en cada uno de los términos aparece un coeficiente que implica la raíz cuadrada de un número complejo, el cual puede salir del

“sándwich” sin dificultad. Esto conduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

De manera análoga, se aplica el siguiente operador a los diferentes kets.

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_2} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_3}-1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_1} | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}-1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 2, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_1} | n'_0, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}-1} | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

En consecuencia, nuevamente se produce un término que puede salir en cada uno de los “sándwiches”,

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)(n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned} \tag{C.305}$$

Se observa que los dos últimos operadores que faltan por operar sobre los diferentes kets son $\hat{a}_{k_2}^\dagger$ y $\hat{a}_{k_1}^\dagger$, respectivamente. Por lo tanto, al aplicar $\hat{a}_{k_2}^\dagger$, se obtiene:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)(n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_2}+1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_2}+1, n'_{k_3}-2, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_2}+1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}-2, n'_{k_2}+1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_2}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_2}+1} | n'_0, \dots, n'_{k_1}-1, n'_{k_2}+1, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

donde $\sqrt{n'_{k_2} + 1}$ es un coeficiente que puede salir de cada sándwich, lo que nos lleva a:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 2, n'_{k_2} + 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

y al operar $\hat{a}_{k_1}^\dagger$, obtenemos:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& \quad \quad \quad = \sqrt{n'_{k_1} + 1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} + 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 2, n'_{k_2} + 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& \quad \quad \quad = \sqrt{n'_{k_1} - 1} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2} + 1, \dots, n'_\infty \rangle \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t), \\
& \quad \quad \quad = \sqrt{n'_{k_1}} | n'_0, \dots, n'_{k_1}, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle
\end{aligned}$$

donde aparece un término de raíz cuadrada que puede salir de cada “sándwich” y resulta en lo siguiente:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} + 1, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} - 1, n'_{k_2} + 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_2} + 1} \sqrt{n'_{k_1}} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, \dots, n_\infty | n'_0, \dots, n'_{k_1}, n'_{k_2} + 1, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Dado que los estados son ortonormales (ver ecuación (4.49)), la expresión anterior adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_3}} (n'_{k_3} - 1) (n'_{k_2} + 1) (n'_{k_1} + 1) \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1}+1 n_{k_1}} \delta_{n'_{k_2}+1 n_{k_2}} \delta_{n'_{k_3}-2 n_{k_3}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_1}} (n'_{k_1} - 1) (n'_{k_2} + 1) (n'_{k_1} - 1) \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \delta_{n'_1 n_1} \dots \delta_{n'_{k_1}-1 n_{k_1}} \delta_{n'_{k_2}+1 n_{k_2}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum \sum \sum \sqrt{n'_{k_3} n'_{k_1}} (n'_{k_2} + 1) n'_{k_1} \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} n_{k_1}} \delta_{n'_{k_2}+1 n_{k_2}} \delta_{n'_{k_3}-1 n_{k_3}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

De esta manera, la suma $\sum_{n'}$ se restringirá en cada término por los deltas de Kronecker, lo que resulta en:

$$\begin{aligned}
V'_1 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_4} \sum \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_{k_4}+1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1) (n_{k_3} + 2)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}-1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+2, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2} \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_1} + 1) n_{k_2}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}+1, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq k_3} \sum \sum \sum \langle k_1, k_2 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1} n_{k_2} (n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_{k_2}-1, \dots, n_{k_3}+1, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{C.306}$$

Calculo de términos para V'_2

De manera análoga a lo anterior, para calcular los términos correspondientes a V'_2 , se utilizarán las definiciones (4.55) y (4.56). Aplicando el primer operador a los distintos términos, se obtiene:

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \underbrace{(\hat{a}_{k_4} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_4}} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{\hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}}_{=\hat{n}_{k_1}} \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{\hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}}_{=\hat{n}_{k_1}} \underbrace{(\hat{a}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

donde el término de la raíz cuadrada puede salir de los diferentes “sándwiches”.

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{n}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{n}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

De esta manera, se procede a aplicar los operadores restantes;

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_3}} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_3} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_3}-1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{n}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{n}_{k_1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}-1} \sqrt{n'_{k_1}-1} | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

donde los términos con raíz cuadrada pueden salir de los diferentes sándwiches.

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Continuamos aplicando los operadores a los diferentes kets.

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}+1}|n'_0, \dots, n'_{k_1}+1, \dots, n'_{k_3}-1, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{(\hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle)}_{=\sqrt{n'_{k_1}+1}|n'_0, \dots, n'_{k_1}+1, \dots, n'_{k_3}-2, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{| n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle}_{=\sqrt{n'_{k_1}+1}|n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1}+1, \dots, n'_{k_3}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger \underbrace{| n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1} - 1, \dots, n'_\infty \rangle}_{=\sqrt{n'_{k_1}}|n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1}-1, \dots, n'_\infty \rangle} \rangle C_{\{n'\}}(t),
\end{aligned}$$

donde los términos de raíz pueden salir de los diferentes sándwiches,

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Se aplica el último operador a los kets restantes, lo que resulta en,

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \underbrace{\hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle}_{=\sqrt{n'_{k_1}+2}|n'_0, \dots, n'_{k_1}+2, \dots, n'_{k_3}-1, n'_{k_4}-1, \dots, n'_\infty \rangle} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | \underbrace{\hat{a}_{k_1}^\dagger | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle}_{=\sqrt{n'_{k_1}+2}|n'_0, \dots, n'_{k_1}+2, \dots, n'_{k_3}-2, \dots, n'_\infty \rangle} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

El término de la raíz puede ser extraído de los diversos sandwiches.

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4}} \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \sqrt{n'_{k_1} + 2} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 2, \dots, n'_{k_3} - 1, n'_{k_4} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_3} - 1} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \sqrt{n'_{k_1} + 2} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, \dots, n'_{k_1} + 2, \dots, n'_{k_3} - 2, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, \dots, n'_{k_1} + 1, \dots, n'_{k_3} - 1, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \langle n_0, n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_0, n'_1, n'_2, \dots, n'_{k_1}, \dots, n'_\infty \rangle C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Dado que los estados son ortonormales (ver ecuación (4.49)), la expresión anterior adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n'_{k_4} n'_{k_3} (n'_{k_1} + 1) (n'_{k_1} + 2)} \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} + 2 n_{k_1}} \dots \delta_{n'_{k_3} - 1 n_{k_3}} \delta_{n'_{k_4} - 1 n_{k_4}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3} (n'_{k_3} - 1) (n'_{k_1} + 1) (n'_{k_1} + 2)} \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} + 2 n_{k_1}} \dots \delta_{n'_{k_3} - 2 n_{k_3}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n'_{k_3}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} + 1} \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} + 1 n_{k_1}} \dots \delta_{n'_{k_3} - 1 n_{k_3}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t) \\
& + \sum_{\{n'\}} \frac{1}{2} \sum_{k_1} \sum \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{n'_{k_1}} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1} - 1} \sqrt{n'_{k_1}} \times \\
& \times \delta_{n'_0 n_0} \dots \delta_{n'_{k_1} n_{k_1}} \dots \delta_{n'_\infty n_\infty} C_{\{n'\}}(t).
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la suma $\sum_{n'}$ será restringida en cada término por los deltas de Kronecker, lo que resulta en:

$$\begin{aligned}
V'_2 = & \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3 \neq k_4} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_4 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)(n_{k_4} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_{k_4} + 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_3, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)(n_{k_3} + 2)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 2, \dots, n_{k_3} + 2, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_3} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_3 \rangle \sqrt{n_{k_1}(n_{k_1} - 1)(n_{k_1} - 1)(n_{k_3} + 1)} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1} - 1, \dots, n_{k_3} + 1, \dots, n_\infty)}(t) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1} \langle k_1, k_1 | \hat{u} | k_1, k_1 \rangle \sqrt{(n_{k_1} - 1)(n_{k_1} - 1)n_{k_1}n_{k_1}} \times \\
& \times C_{(n_0, n_1, \dots, n_{k_1}, \dots, n_\infty)}(t).
\end{aligned} \tag{C.307}$$

Apéndice D

CUDA

La explicación técnica de CUDA puede resultar laboriosa. Por consiguiente, este apéndice se enfocará exclusivamente en exponer la importancia del cálculo paralelo, dado que muchos trabajos de investigación requieren de este método, y es precisamente el método utilizado en este trabajo.

Computación en sistemas heterogéneos

Para comprender cómo CUDA contribuye a realizar cálculos más rápidos, se puede comenzar preguntando: ¿Cómo se logra la rapidez de los cálculos en CUDA? Para ello, es necesario entender a qué se refieren las GPU y las CPU. La computación sobre tarjetas gráficas (GPU computing) se define como el uso de una tarjeta gráfica (GPU - Unidad de Procesamiento Gráfico) para realizar cálculos científicos de propósito general. Este enfoque fusiona una CPU (unidad central de procesamiento) y una GPU para crear un modelo de computación heterogéneo. En este modelo, la parte secuencial de una aplicación se ejecuta en la CPU (conocida también como host), mientras que la parte más intensiva en cálculos se delega a la GPU (referida como device). Desde la perspectiva del usuario, la aplicación simplemente opera con mayor velocidad al aprovechar el alto rendimiento de la GPU.

Por otro lado, la rapidez de los cálculos al aplicar código en CUDA se fundamenta en la capacidad de ejecutar múltiples tareas de manera simultánea. En CUDA, se establecen bloques e hilos que colaboran en la realización de tareas de forma paralela. La organización y gestión de estos bloques se realiza mediante el concepto de Grid, el cual está compuesto por un número determinado de bloques (dimensión del Grid), de manera similar cada bloque tiene una cantidad definida de hilos (dimensión del bloque). Cada hilo puede hacer una tarea en simultánea con los demás hilos, por consiguiente, al definir el Grid y el bloque se define el número de tareas que se va a realizar en paralelo.

Cada núcleo de una GPU puede realizar una sola tarea, es decir, cada núcleo equivale a un hilo, mientras que en una CPU cada núcleo puede manejar 2 tareas simultáneamente, lo que significa que por cada núcleo de CPU se tienen 2 hilos. En resumen, si N es el número de núcleos, entonces se tienen N hilos si es una GPU y $2N$ hilos si es una CPU. La diferencia radica en que el número de núcleos de una GPU es ordenes de magnitud más grande que para una CPU. Por esta razón, se utilizan las GPU para paralelizar cálculos.

Ejemplo Comparativo de Computación en CPU y GPU

Especificaciones del Hardware

- Procesador (CPU): **Ryzen™ 9 7950x**
 - **Núcleos:** 16
 - **Hilos:** 32
 - **Frecuencia:** 4.50 GHz
- Tarjeta Gráfica (GPU): **NVIDIA® GeForce RTX® 4090**
 - **Núcleos:** 16384
 - **Hilos:** 16384
 - **Frecuencia:** 1.67 GHz

Como se puede observar en el ejemplo, un procesador doméstico de gama alta tiene 32 hilos, mientras que una GPU doméstica de alta gama tiene 16284 hilos. A pesar de que estos últimos sean más lentos, la gran cantidad de hilos hace que la GPU tenga una mayor potencia de procesamiento. Para entender cómo estas especificaciones se traducen en rendimiento computacional, consideremos una tarea simple que se puede paralelizar, como sumar dos vectores de gran tamaño.

Imaginemos que tenemos dos vectores de 100 componentes y queremos sumarlos utilizando a un trabajador rápido (CPU) que puede hacer una suma en un segundo. Este trabajador tardaría

100 segundos en hacer la suma de los dos vectores. Por otro lado, si tenemos 50 trabajadores lentos (GPU), a los cuales les toma 4 segundos hacer una suma, en este caso, aunque sean más lentos, debido a la cantidad de trabajadores, solo les tomaría 8 segundos hacer la suma de los dos vectores.

Paralelización del Código con PyCUDA y la Computación GPU

En el código del programa E, se ilustra cómo se utiliza la computación GPU a través de PyCUDA para realizar cálculos intensivos en paralelo. La estructura del código y la implementación de kernels CUDA permiten aprovechar la gran cantidad de núcleos de procesamiento de una GPU para acelerar operaciones matemáticas. A continuación, se explica de manera general qué partes del código se paralelizan y cuáles no, así como las razones detrás de estas decisiones.

Partes Paralelizadas del Código

Dada la independencia de cada componente de la matriz, la cual tiene un tamaño de 512×512 , es decir, de 262144 componentes, se realiza la creación de matrices directamente en la GPU. Los kernels para operaciones elemento a elemento son aquellos que realizan operaciones en paralelo para cada componente de las matrices GPU. Asimismo, los kernels para operaciones de reducción son aquellos que efectúan operaciones como la suma de productos elementales, aprovechando enormemente la arquitectura paralela de la GPU.

En el código, también se calcula el laplaciano de las funciones de onda, proceso que se ejecuta en paralelo para cada punto de la malla. De igual manera, se implementa el método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4) para la integración temporal, el cual es en serie, pero se paraleliza para cada punto de la malla al calcular sus derivadas. El cálculo de la energía del sistema se realiza de manera paralela para cada punto de la malla, al igual que el cálculo de la norma de las funciones de onda, que es esencial para la normalización. Además, las funciones de corte, que efectúan cortes en la función de onda, también se pueden paralelizar al evaluar el Hamiltoniano aplicado a la función.

No todas las partes del código pueden ser paralelizadas debido a las siguientes razones:

- **Dependencias Secuenciales:** Algunas operaciones deben ejecutarse en un orden específico, como la preparación de argumentos y la configuración inicial de los kernels, como el método de RK4.
- **Control de Flujo:** La lógica de control, como la secuencia de llamados a los kernels y la gestión de la memoria, no se puede paralelizar y debe manejarse de manera secuencial.

La principal ventaja de paralelizar este tipo de cálculos es la significativa reducción en el tiempo de ejecución para operaciones intensivas. La capacidad de ejecutar miles de hilos en paralelo en una GPU permite manejar grandes matrices y realizar cálculos complejos en un tiempo mucho menor en comparación con una CPU.

Apéndice E

Código del programa

El código empleado en esta investigación se basa en una formulación original propuesta por mi asesor, [Madroñero Carvajal \(2018\)](#). Para nuestro estudio, adaptamos este código para calcular el estado estacionario resolviendo numéricamente la ecuación de Gross-Pitaevskii espinorial, utilizando un potencial externo definido en una red cuadrada. Con este fin, implementamos el método de tiempo imaginario, el método de Runge-Kutta de cuarto orden y aprovechamos la capacidad de cómputo en paralelo de CUDA. A continuación, se presenta el código utilizado para las simulaciones, el cual está escrito en Python, PyCUDA y CUDA. Es importante señalar que el siguiente código es una versión general. El código se divide en dos partes: el principal, desarrollado en Python y PyCUDA, y el secundario (Kernels), escritos en CUDA (C).

E.1. Código principal

A continuación se presenta un ejemplo del código escrito en Python y PyCUDA.

```
[1]: %pylab inline

prec = float32          # Tipo de datos de precisión para números en punto flotante.
precComplex = complex64 # Tipo de datos de precisión compleja para números complejos.
cuPrec = 'float'        # Tipo de datos de precisión para el código CUDA.
cString = 'f'           # Caracteres que representa el tipo de datos de precisión.
Nx = int32(512)          # Número de puntos de la cuadrícula en la dirección x.
Ny = int32(512)          # Número de puntos de la cuadrícula en la dirección y.
Lx = prec(40)            # Longitud total del dominio en la dirección x.
Ly = prec(40)            # Longitud total del dominio en la dirección y.
x_min = prec(-Lx/2.0)    # Valor mínimo en el eje x del dominio.
y_min = prec(-Ly/2.0)    # Valor mínimo en el eje y del dominio.
dx = prec(Lx/(Nx-1))     # Tamaño del paso en la dirección x.
dy = prec(Ly/(Ny-1))     # Tamaño del paso en la dirección y.
```

%pylab is deprecated, use %matplotlib inline and import the required libraries.
Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib

```
[2]: # Cargar paqueterías necesarias para trabajar en la GPU (pyCUDA)
from pycuda import gpuarray
from pycuda import autoinit
from pycuda.compiler import SourceModule
from pycuda.elementwise import ElementwiseKernel
from pycuda.reduction import ReductionKernel
from pycuda import driver as cuda
from pycuda import curandom
from pycuda.tools import DeviceData
from pycuda import compiler
import pycuda.driver as drv
```

```
[3]: # funciones en Python
def compileGPU(stringKernel): #Specific function
    stringKernel = stringKernel.replace('cudaPres', cuPrec)
    stringKernel = stringKernel.replace('cString', cString)
    return SourceModule(stringKernel)
def normalizeGPU(psiGPU):
    norm = get_Norm_C(dx,dy,psiGPU).get()
    norm = 1/sqrt(norm)
    mult_C(norm,psiGPU)
    return norm
def plotState(psi):
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(5,5))
    dens = ax.imshow(psi,extent=[x_min,x_min+dx*Nx,y_min,y_min+dy*Ny], cmap='magma',
    ↪origin='lower')
    colorbar(dens)
def constantes(a0,a2):
    return (0.14099405528194853*a2,0.14099405528194853*(2*a0+a2)/3)
```

```

# Funciones en PyCUDA
copy_C = ElementwiseKernel(arguments="pycuda::complex<{0}> *psi1, pycuda::complex<{0}>_
↳*psi2".format( cuPrec ),
                           operation = "psi2[i] = psi1[i] ",
                           name = "multiplyByFloat_kernel",
                           preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")
mult_C = ElementwiseKernel(arguments="{0} a, pycuda::complex<{0}> *psi".format( cuPrec_
↳),
                           operation = "psi[i] = a*psi[i] ",
                           name = "multiplyByFloat_kernel",
                           preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")
get_Norm_C = ReductionKernel( prec,
                              neutral = "0",
                              arguments=" {0} dx, {0} dy,  pycuda::complex<{0}> *_
↳psi ".format(cuPrec),
                              map_expr = "( conj(psi[i])* psi[i] )._M_re*dx*dy",
                              reduce_expr = "a+b",
                              name = "getNorm_kernel",
                              preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")
get_integral_2D = ReductionKernel( precComplex,
                                   neutral = "0",
                                   arguments=" {0} dx, {0} dy,  pycuda::complex<{0}> *_
↳psi ".format(cuPrec),
                                   map_expr = "(psi[i])._M_re * dx*dy",
                                   reduce_expr = "a+b",
                                   name = "getintegral_kernel",
                                   preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")

cudarandom = curandom.XORWOWRandomNumberGenerator()
real_gpu = cudarandom.gen_uniform([Nx,Ny],prec)

# Definición del tamaño de los bloques y grids
blockDims=(int(8),int(8),int(1))
gridDims = (int(Nx//blockDims[0]+1*(Nx%blockDims[0]!=0)),
            int(Ny//blockDims[1]+1*(Ny%blockDims[1]!=0)),int(1))

```

```

[4]: # definen las dimensiones del bloque y de la cuadrícula para la ejecución de kernels_
↳CUDA en la GPU.
blockDims,gridDims

```

```

[4]: ((8, 8, 1), (64, 64, 1))

```

```
[5]: # Carga un archivo de kernels CUDA, lo compila utilizando PyCUDA
      # y prepara funciones específicas del kernel para su ejecución en la GPU.
```

```
# Abre el archivo que contiene los kernels CUDA
filekernels = open('./kernels/kernelsEstacionario.cu')
Kernels = filekernels.read()
filekernels.close()

# Compila los kernels CUDA utilizando PyCUDA
Kernel= compileGPU(Kernels)

# Prepara funciones específicas del kernel para su ejecución en la GPU
Semilla = Kernel.get_function( "init_kernel" )
Semilla.prepare('ffffffffPP')

Lap = Kernel.get_function('Lap_kernel')
Lap.prepare('ffffPP')

stepRk4 = Kernel.get_function('rk4Step')
stepRk4.prepare('ffffffffPPPPPPPP')

Energia = Kernel.get_function('energy_kernel')
Energia.prepare('ffffffffPPP')

Norma = Kernel.get_function('norma_kernel')
Norma.prepare('PPP')

Corte = Kernel.get_function('corte_kernel')
Corte.prepare('ffffPPPP')

CorteDerecho = Kernel.get_function('corte_kernel_derecho')
CorteDerecho.prepare('ffffPPPP')

CorteIzquierdo = Kernel.get_function('corte_kernel_izquierdo')
CorteIzquierdo.prepare('ffffPPPP')
```

```
[5]: <pycuda._driver.Function at 0x737d78469dc0>
```

```
[6]: # Método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4) aplicado en la GPU.
      # Calcula las derivadas temporales de las funciones de onda, la energía del sistema
      # y normaliza las funciones de onda resultantes. Los resultados de la energía y la
      ↪normalización
      # se almacenan en las listas En y NormaP/NormaM respectivamente.
```

```
NormaP=[]
NormaM=[]
En = []
```

```

def fftRk4Step():
    global t
    # Calcula las derivadas temporales de las funciones de onda
    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_L.gpudata)
    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_L.gpudata)

    # Aplica el método RK4
    stepRk4.prepared_call(gridDims, blockDims, prec(0.5), prec(1/6.), dtau,
                          x_min, y_min, dx, dy, V0, g2, g3,
                          Psi2DP_gpu.gpudata,
                          Psi2DM_gpu.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_k.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_k.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_L.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_L.gpudata)

    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_L.gpudata)
    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_L.gpudata)

    stepRk4.prepared_call(gridDims, blockDims, prec(0.5), prec(2/6.), dtau,
                          x_min, y_min, dx, dy, V0, g2, g3,
                          Psi2DP_gpu.gpudata,
                          Psi2DM_gpu.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_k.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_k.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_L.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_L.gpudata)

    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_L.gpudata)
    Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                      Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_L.gpudata)

    stepRk4.prepared_call(gridDims, blockDims, prec(1.0), prec(2/6.), dtau,
                          x_min, y_min, dx, dy, V0, g2, g3,
                          Psi2DP_gpu.gpudata,
                          Psi2DM_gpu.gpudata,
                          Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                          Psi2DM_gpu_new.gpudata,

```

```

        Psi2DP_gpu_k.gpudata,
        Psi2DM_gpu_k.gpudata,
        Psi2DP_gpu_L.gpudata,
        Psi2DM_gpu_L.gpudata)

Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                  Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_L.gpudata)
Lap.prepared_call(gridDims, blockDims, dx, dy, x_min, y_min,
                  Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_L.gpudata)

stepRk4.prepared_call(gridDims, blockDims, prec(0.0), prec(1/6.), dtau,
                      x_min, y_min, dx, dy, V0, g2, g3,
                      Psi2DP_gpu.gpudata,
                      Psi2DM_gpu.gpudata,
                      Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                      Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                      Psi2DP_gpu_k.gpudata,
                      Psi2DM_gpu_k.gpudata,
                      Psi2DP_gpu_L.gpudata,
                      Psi2DM_gpu_L.gpudata)

# Normaliza las funciones de onda resultantes
NR=get_Norm_C(dx,dy,Psi2DP_gpu_new).get()+get_Norm_C(dx,dy,Psi2DM_gpu_new).get()
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DP_gpu_new)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DM_gpu_new)

# Calcula la energía del sistema
Energia.prepared_call(gridDims, blockDims, x_min, y_min,
                      dx, dy, V0, g2, g3,
                      Psi2DP_gpu.gpudata,
                      Psi2DM_gpu.gpudata,
                      Psi2DP_gpu_L.gpudata,)

# Almacena los resultados de energía y normalización
En.append(abs(get_integral_2D(dx,dy,Psi2DP_gpu).get()))
copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu)
copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu_k)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu_k)

t += dtau

```

[7]: *# Matrices en la GPU que representan las funciones de onda*
\psi_{1} (Psi2DP_gpu), y \psi_{-1} (Psi2DM_gpu)

```

Psi2DP_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)

```

```

Psi2DP_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_L = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_L = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)

# Inicializa las funciones de onda utilizando un kernel llamado "Semilla"
omega=0.001
Semilla.prepared_call(gridDims, blockDims,
                      prec(dx), prec(dy),
                      prec(x_min), prec(y_min),
                      prec(omega), prec(omega), prec(-1),
                      real_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu.gpudata)
Semilla.prepared_call(gridDims, blockDims,
                      prec(dx), prec(dy),
                      prec(x_min), prec(y_min),
                      prec(omega), prec(omega), prec(1),
                      real_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu.gpudata)

# Calcula la norma de las funciones de onda
NR = get_Norm_C(dx,dy,Psi2DP_gpu).get()+get_Norm_C(dx,dy,Psi2DM_gpu).get()

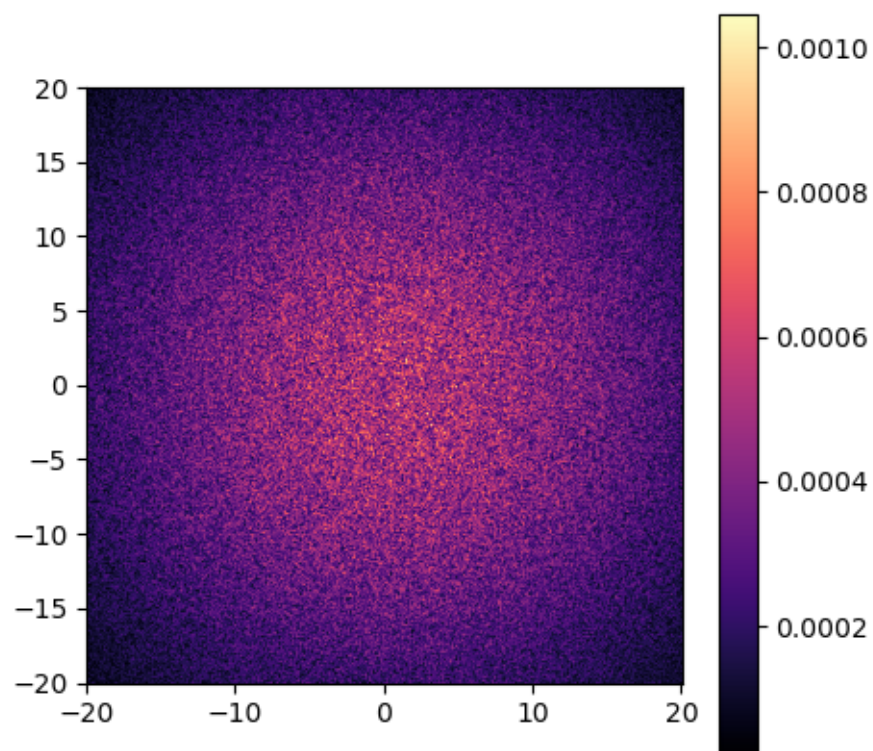
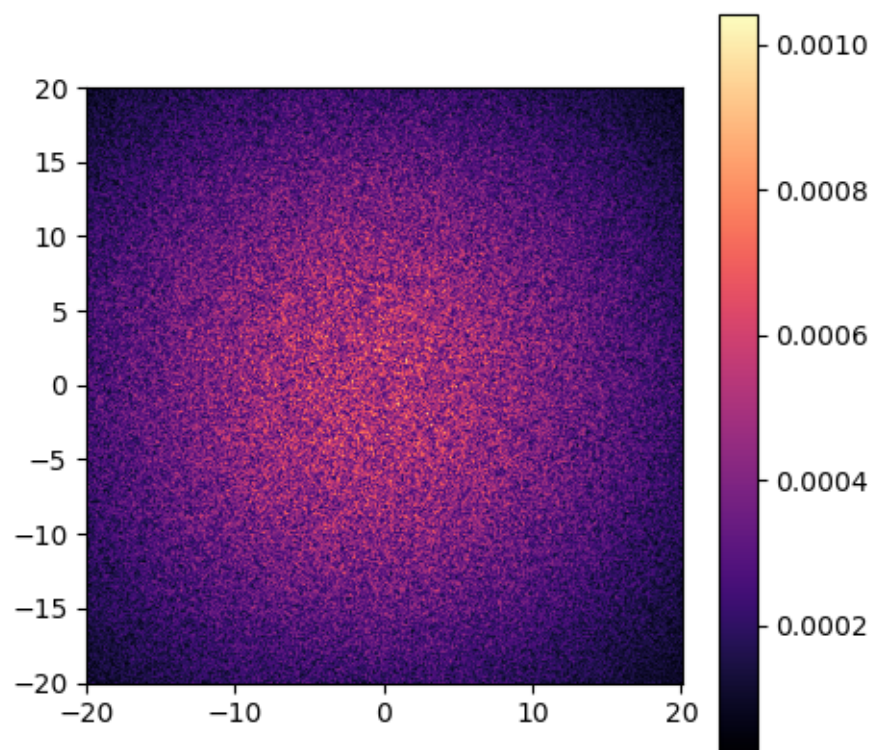
# Normaliza las funciones de onda
mult_C(1/sqrt(NR), Psi2DP_gpu)
mult_C(1/sqrt(NR), Psi2DM_gpu)

```

```

[8]: # Grafica semilla
plotState(abs(Psi2DP_gpu.get())**2)
plotState(abs(Psi2DM_gpu.get())**2)

```

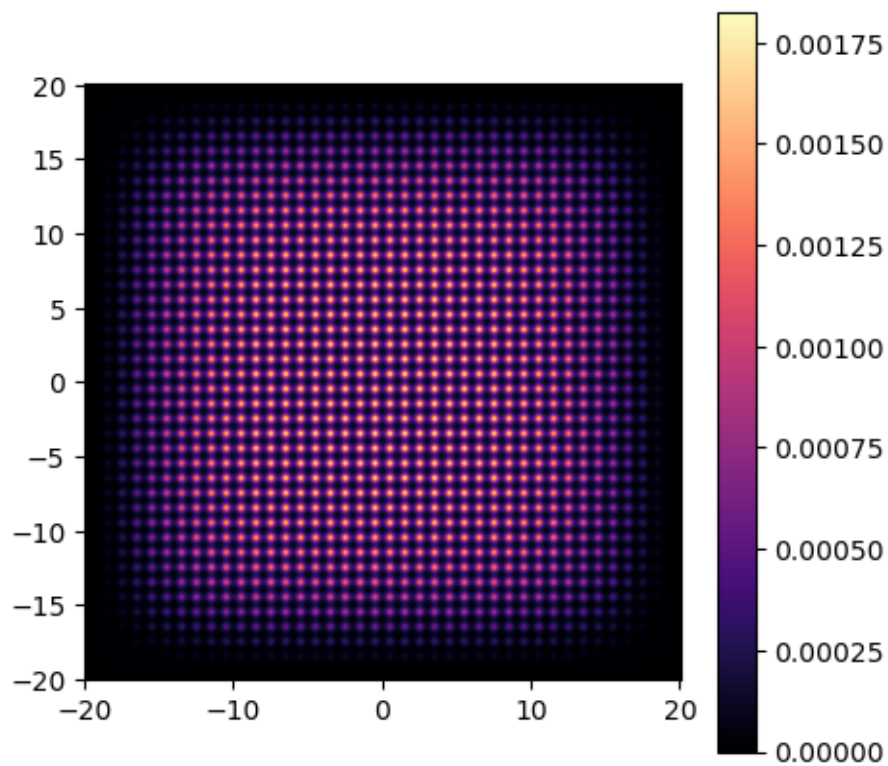


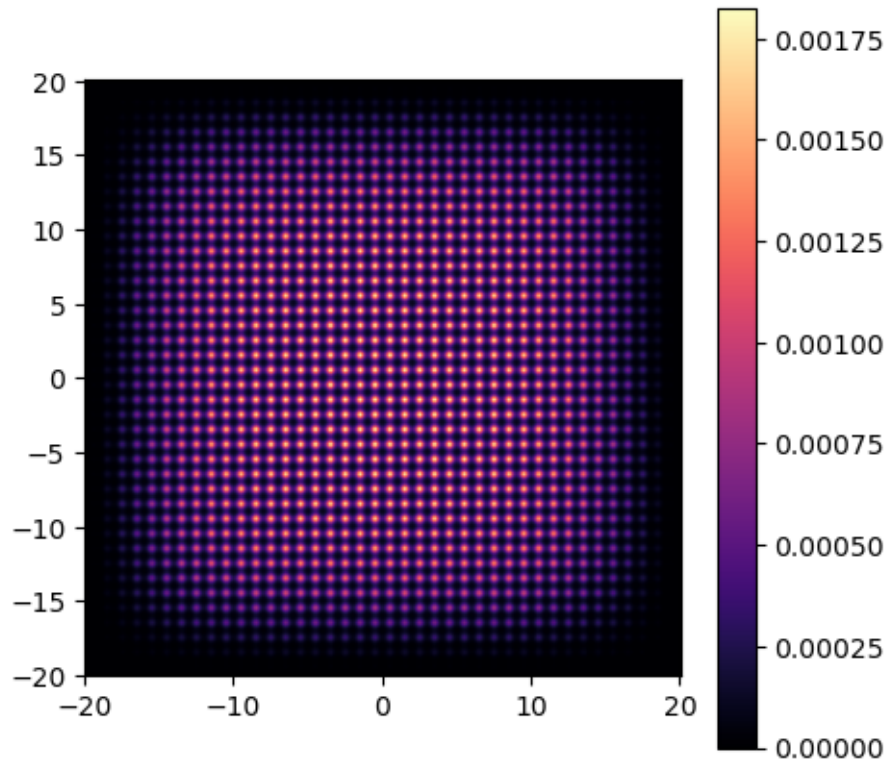
```
[9]: %%time
      # Calculo del estado estacionario en mezcla
      g2=prec(15)
      g3=prec(10)
      V0=prec(3)
      t =0
      dtau = prec(0.015)
      for i in range(80000):
          fftRk4Step()
```

CPU times: user 1min 43s, sys: 0 ns, total: 1min 43s

Wall time: 1min 43s

```
[10]: plotState(abs(Psi2DP_gpu.get())**2)
      plotState(abs(Psi2DM_gpu.get())**2)
```





[11]:

```

Psi2DP_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_L = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_L = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)

omega=0.001
Semilla.prepared_call(gridDims, blockDims,
                      prec(dx), prec(dy),
                      prec(x_min), prec(y_min),
                      prec(omega), prec(omega), prec(-1),
                      real_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu.gpudata)
Semilla.prepared_call(gridDims, blockDims,
                      prec(dx), prec(dy),
                      prec(x_min), prec(y_min),
                      prec(omega), prec(omega), prec(1),
                      real_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu.gpudata)

NR = get_Norm_C(dx,dy,Psi2DP_gpu).get()+get_Norm_C(dx,dy,Psi2DM_gpu).get()
mult_C(1/sqrt(NR), Psi2DP_gpu)
mult_C(1/sqrt(NR), Psi2DM_gpu)

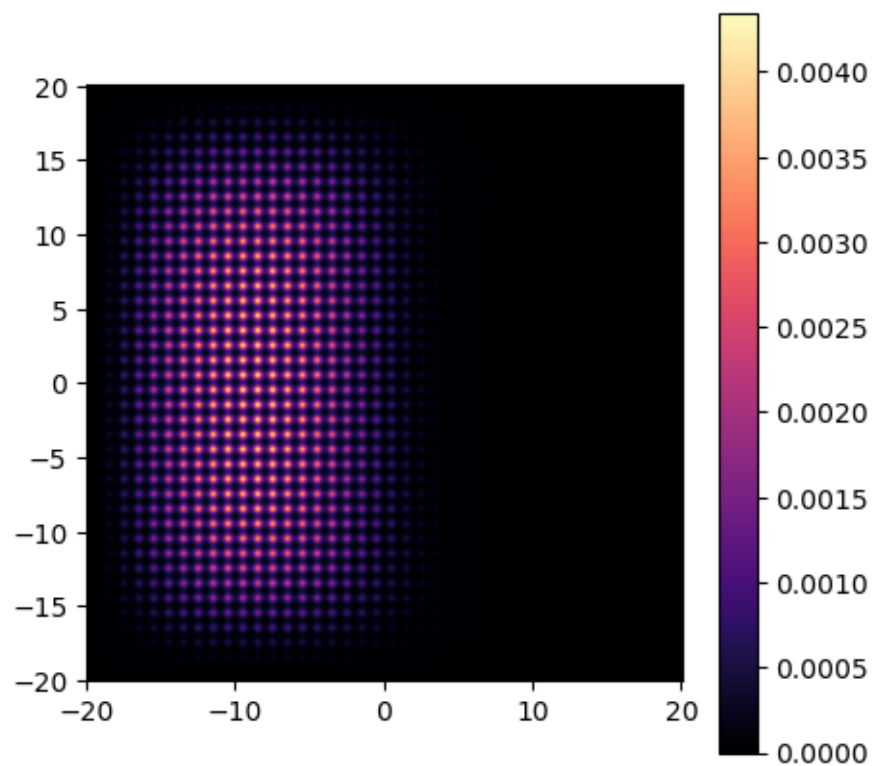
```

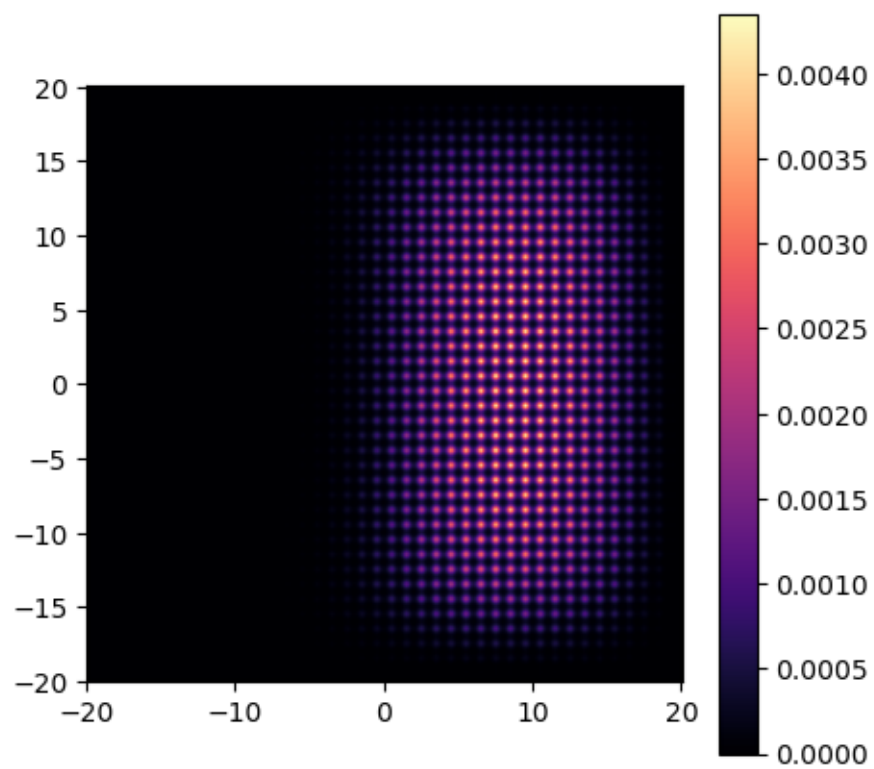
```
[12]: %%time
      # Calculo del estado estacionario en separación de fase
      g2=prec(10)
      g3=prec(14)
      V0=prec(3)
      t =0
      dtau = prec(0.015)
      for i in range(80000):
          fftRk4Step()
```

CPU times: user 1min 44s, sys: 0 ns, total: 1min 44s

Wall time: 1min 44s

```
[13]: plotState(abs(Psi2DP_gpu.get())**2)
      plotState(abs(Psi2DM_gpu.get())**2)
```






```

29         pycuda::complex<cudaPres> *psi,
30         pycuda::complex<cudaPres> *kauxp){
31
32     int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
33     int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
34     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
35     int tid_L = gridDim.y * blockDim.y * t_i + (t_j-1 );
36     int tid_R = gridDim.y * blockDim.y * t_i + (t_j+1 );
37     int tid_U = gridDim.y * blockDim.y * (t_i+1 ) + t_j ;
38     int tid_D = gridDim.y * blockDim.y * (t_i-1 ) + t_j ;
39     cudaPres x = t_i*dx + xMin;
40     cudaPres y = t_j*dy + yMin;
41
42     pycuda::complex<cudaPres> result;
43
44     if (x==xMin || x==xMin || y==yMin || y==yMin){
45     kauxp[tid]=0;
46     }
47     else {
48     pycuda::complex<cudaPres> left  = psi[tid_L];
49     pycuda::complex<cudaPres> right = psi[tid_R];
50     pycuda::complex<cudaPres> up    = psi[tid_U];
51     pycuda::complex<cudaPres> down  = psi[tid_D];
52     pycuda::complex<cudaPres> center = psi[tid];
53
54     result = (left + right - 2.0cString*center)/(dx*dx) ;
55     result += (up + down - 2.0cString*center)/(dy*dy) ;
56     result *= 1.0cString;
57     kauxp[tid]=result;
58     }
59
60 }
61
62
63 __global__ void rk4Step(cudaPres ak, cudaPres apsi, cudaPres dt,
64                         cudaPres xMin, cudaPres yMin,
65                         cudaPres dx, cudaPres dy,
66                         cudaPres v0, cudaPres g2, cudaPres g3,

```

```

67         pycuda::complex<cudaPres> *psip_old,
68         pycuda::complex<cudaPres> *psim_old,
69         pycuda::complex<cudaPres> *psip_new,
70         pycuda::complex<cudaPres> *psim_new,
71         pycuda::complex<cudaPres> *kauxp,
72         pycuda::complex<cudaPres> *kauxm,
73         pycuda::complex<cudaPres> *psip_Lap,
74         pycuda::complex<cudaPres> *psim_Lap) {
75
76     int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
77     int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
78     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
79
80     cudaPres x = t_i*dx + xMin;
81     cudaPres y = t_j*dy + yMin;
82
83     pycuda::complex<cudaPres> iComplex(0,1.0cString);
84     pycuda::complex<cudaPres> psi1 = psip_old[tid];
85     pycuda::complex<cudaPres> psim1 = psim_old[tid];
86     pycuda::complex<cudaPres> kiAux1=kauxp[tid];
87     pycuda::complex<cudaPres> kiAuxm1=kauxm[tid];
88
89     pycuda::complex<cudaPres> result1, result3;
90     cudaPres pi=3.14159265;
91
92
93     // Calculating ki
94
95
96     // m=1
97     // Potencial
98     result1 = v0*(cos(pi*x)*cos(pi*x) + cos(pi*y)*cos(pi*y));
99     // contacto
100    result1 += g2*kiAux1*conj(kiAux1) + g3*kiAuxm1*conj(kiAuxm1);
101    // psi1
102    result1 *= kiAux1;
103    //cinetica
104    result1 += -0.101321cString*psip_Lap[tid];

```

```

105
106     // evolucion imaginaria
107     result1 *= -1;
108
109
110     // m=-1
111     // Potencial
112     result3 = v0*(cos(pi*x)*cos(pi*x) + cos(pi*y)*cos(pi*y));
113     // contacto
114     result3 += g2*kiAuxm1*conj(kiAuxm1) + g3*kiAuxl*conj(kiAuxl);
115     // psiml
116     result3 *= kiAuxm1;
117     //cinetica
118     result3 += -0.101321cString*psim_Lap[tid];
119
120     // evolucion imaginaria
121     result3 *= -1;
122
123
124     // psi_aux for next k_i+1
125     kauxp[tid] = psi1 + ak * dt * result1;
126     kauxm[tid] = psiml + ak * dt * result3;
127
128     psip_new[tid] += apsi * dt * result1;
129     psim_new[tid] += apsi * dt * result3;
130     if (x==xMin || x==xMin || y==yMin || y==yMin){
131         psip_new[tid]=0;
132         psim_new[tid]=0;
133     }
134
135 }
136
137 __global__ void energy_kernel( cudaPres xMin, cudaPres yMin,
138                               cudaPres dx, cudaPres dy,
139                               cudaPres v0, cudaPres g2, cudaPres g3,
140                               pycuda::complex<cudaPres> *psip,
141                               pycuda::complex<cudaPres> *psim,
142                               pycuda::complex<cudaPres> *psip_Lap) {

```

```

143
144     int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
145     int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
146     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
147     cudaPres x = t_i*dx + xMin;
148     cudaPres y = t_j*dy + yMin;
149
150     pycuda::complex<cudaPres> Aux;
151     pycuda::complex<cudaPres> psil = psip[tid];
152     pycuda::complex<cudaPres> psiml= psim[tid];
153     cudaPres pi = 3.14159265;
154
155     cudaPres vp = v0*(cos(pi*x)*cos(pi*x) + cos(pi*y)*cos(pi*y));
156
157     pycuda::complex<cudaPres> Kinetic = -0.101321cString * psip_Lap[tid
158         ];
159
160     pycuda::complex<cudaPres> NL = g2*psil*conj(psil)*psil* + g3*psiml*
161         conj(psiml)*psil;
162
163     Aux = vp + Kinetic + NL;
164     Aux *= conj(psil);
165     psip_Lap[tid] = Aux;
166 }
167
168 __global__ void norma_kernel(pycuda::complex<cudaPres> *psinew,
169                             pycuda::complex<cudaPres> *psiold,
170                             pycuda::complex<cudaPres> *psiaux){
171
172     int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
173     int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
174     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
175
176     psiaux[tid]= abs(psinew[tid]-psiold[tid]);
177 }
178

```

```
179
180
181 __global__ void corte_kernel(cudaPres xMin, cudaPres yMin,
182                             cudaPres dx, cudaPres dy,
183                             pycuda::complex<cudaPres> *psip,
184                             pycuda::complex<cudaPres> *psim,
185                             pycuda::complex<cudaPres> *auxpsip,
186                             pycuda::complex<cudaPres> *auxpsim) {
187
188     int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
189     int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
190     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
191     //cudaPres x = t_i*dx + xMin;
192     cudaPres y = t_j*dy + yMin;
193
194     if(y>0) {
195         auxpsip[tid] = psip[tid];
196         auxpsim[tid] = 0;
197     }
198     else{
199         auxpsip[tid] = 0;
200         auxpsim[tid] = psim[tid];
201     }
202 }
203
204
205 __global__ void corte_kernel_izquierdo(cudaPres xMin, cudaPres yMin,
206                                         cudaPres dx, cudaPres dy,
207                                         pycuda::complex<cudaPres> *psip,
208                                         pycuda::complex<cudaPres> *psim,
209                                         pycuda::complex<cudaPres> *auxpsip,
210                                         pycuda::complex<cudaPres> *auxpsim)
211     {
212     int t_i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
213     int t_j = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;
214     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
215
```

```
216     cudaPres x = t_i * dx + xMin;
217     cudaPres y = t_j * dy + yMin;
218
219     if (y < 0) {
220         auxpsip[tid] = psip[tid];
221         auxpsim[tid] = psim[tid];
222     } else {
223         auxpsip[tid] = 0;
224         auxpsim[tid] = 0;
225     }
226 }
227
228 __global__ void corte_kernel_derecho(cudaPres xMin, cudaPres yMin,
229                                     cudaPres dx, cudaPres dy,
230                                     pycuda::complex<cudaPres> *psip,
231                                     pycuda::complex<cudaPres> *psim,
232                                     pycuda::complex<cudaPres> *auxpsip,
233                                     pycuda::complex<cudaPres> *auxpsim)
234 {
235     int t_i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
236     int t_j = blockIdx.y * blockDim.y + threadIdx.y;
237     int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
238
239     cudaPres x = t_i * dx + xMin;
240     cudaPres y = t_j * dy + yMin;
241
242     if (y >= 0) {
243         auxpsip[tid] = psip[tid];
244         auxpsim[tid] = psim[tid];
245     } else {
246         auxpsip[tid] = 0;
247         auxpsim[tid] = 0;
248     }
249 }
```