

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



Fases magnéticas en condensados de Bose confinados en redes ópticas

TRABAJO DE GRADO

Para optar el título profesional de:

Físico

Christian Jesús Madroñero Carvajal

San Juan de Pasto, Colombia

Septiembre 2018

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

Fases magnéticas en condensados de Bose confinados en redes ópticas

Christian Jesús Madroño Carvajal

TRABAJO DE GRADO

Directora:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez

Doctora en Ciencias (Física)

San Juan de Pasto, Colombia

Septiembre 2018

©2018 - Christian Jesús Madroñero Carvajal

“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

Rosario Paredes Gutiérrez
Directora

Alvaro Rugeles Pérez
Jurado

Luis Andrés Santacruz
Jurado

San Juan de Pasto, Septiembre 2018



ACUERDO N° 147 DE 2018
(Octubre 10)

Por la cual se otorga una distinción de **Laureado** al trabajo de Grado del estudiante **CHRISTIAN JESUS MADROÑERO CARVAJAL**.

EL CONSEJO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES DE LA UNIVERSIDAD DE NARIÑO, en uso de sus atribuciones reglamentarias y estatutarias y,

CONSIDERANDO:

Que mediante Proposición No.024 de octubre 8 de 2018, el Comité Curricular y de Investigaciones del Departamento de Física, solicitó se otorgue la distinción de LAUREADO al Trabajo de Grado "**FASES MAGNÉTICAS EN CONDENSADOS DE BOSE CONFINADAS EN REDES ÓPTICAS**" desarrollado por el estudiante **CHRISTIAN JESUS MADROÑERO CARVAJAL**, bajo la dirección de la profesora ROSARIO PAREDES de la Universidad Autónoma de México y en calidad de codirector el profesor Yithsbey Giraldo Úsuga y los docentes LUIS ANDRES SANTACRUZ y ALVARO RUGELES PEREZ, como integrantes del Jurado evaluador del mismo;

Que mediante Acuerdo No. 332 del 1 de noviembre de 2005 del Consejo Académico se reglamentó y unificó los criterios y puntajes para la evaluación de trabajos de grado, donde se establecen las distinciones de honor como "Meritorio" cuando el puntaje está entre 95 y 99 puntos y "Laureado" cuando el puntaje corresponde a 100 puntos;

Que en el referido Acuerdo en su Artículo 8° establece: "Los Consejos de Facultad podrán otorgar estas distinciones, previa presentación de la proposición correspondiente por parte de los Comités Curriculares y de Investigaciones, en el cual se adjunte un informe por parte de cada uno de los jurados evaluadores que justifique dicho merecimiento";

Que mediante Acuerdo 077 de mayo 28 de 2018 y previo el cumplimiento de los requisitos exigidos por la Institución, se autorizó la sesión de sustentación del citado Trabajo de Grado;

Que el veintiuno (21) de Septiembre del 2018 el estudiante CHRISTIAN JESUS MADROÑERO CARVAJAL sustentó y aprobó el Trabajo de Grado titulado "**FASES MAGNETICAS EN CONDENSADOS DE BOSE CONFINADAS EN REDES OPTICAS**";

Que la Directora del trabajo de grado en mención es la profesora Rosario Paredes de la Universidad Autónoma de México y codirector el profesor Yithsbey Giraldo Úsuga;

Que según Acuerdo No 027 de Septiembre 20 del 2018, el Comité Curricular designó como jurados evaluadores a los docentes LUIS ANDRES SANTACRUZ Y ALVARO RUGELES;



Que en sesión celebrada el día 21 de septiembre de 2018 los integrantes del Jurado Evaluador otorgaron una calificación conjunta de 100 puntos, hecho consignado en el Acta de Sustentación No. 027 de septiembre 21 de 2018;

Que según comunicaciones emitidas por los integrantes del Jurado Evaluador, se sustenta las razones por las cuales el trabajo antes citado es acreedor a la distinción de LAUREADO;

Que los jurados evaluadores del trabajo de Grado en mención fueron los docentes LUIS ANDRES SANTACRUZ y ALVARO RUGELES PEREZ, quienes emitieron una calificación total al trabajo de grado de de 100 puntos;

Que dada la calificación de 100 puntos, el trabajo de grado cumple con el puntaje para alcanzar la distinción de "Laureado", por lo cual cada uno de los jurados evaluadores remitió informe escrito con las justificaciones correspondientes para otorgar dicho merecimiento;

Que el docente **ALVARO RUGELES PEREZ**, como jurado consideró pertinente otorgar la calificación de Laureado con base en los siguientes aspectos:

- El estudiante realizó un trabajo destacado en el tema de materia ultrafría que es un campo de investigación de gran actualidad. En este sentido desarrolló en forma clara y precisa el objetivo general y los objetivos específicos planteados.
- El Estudiante colaboró con grupos de investigación internacionales que le ayudaron a asimilar nuevas técnicas y metodologías de trabajo, lo que le confiere a su trabajo una mayor relevancia.
- En el trabajo escrito se destaca la redacción y coherencia, demostrando muy buena capacidad en la realización de cálculos y la obtención de simulaciones.
- La sustentación oral se caracterizó por la claridad, precisión y capacidad para transmitir lo esencial de su trabajo, así como para responder a las preguntas que se le plantearon.

Que el docente **LUIS ANDRÉS SANTACRUZ ALMEIDA**, presentó informe justificando que:

- El tema de trabajo es muy interesante en el campo de la materia condensada teórica, en especial en el área de la óptica de materiales. Se resalta en el trabajo del estudiante el gran esfuerzo realizado para la elaboración de los cálculos y la obtención de las simulaciones requeridas para los mismos.
- Interactuar e investigar con grupos de investigación internacionales aprendiendo nuevas técnicas y metodologías de trabajo permitió al estudiante obtener una buena experiencia respecto al trabajo y metodología que se lleva en otras instituciones, dando una mayor relevancia a su trabajo de investigación, ya que por medio de experiencias como estas se



abren puertas y posibles oportunidades para futuras incursiones de otros estudiantes del programa de Física a instituciones internacionales.

- La presentación del trabajo escrito es impecable, la redacción es bastante clara y se maneja en todo el documento el orden y la concordancia esperada para un trabajo de grado de pregrado.
- El estudiante desarrolló en forma clara y precisa el objetivo general y los objetivos específicos planteados.
- La presentación oral de su trabajo estuvo enmarcada dentro de los parámetros esperados, mostrando de forma clara los resultados de su trabajo y respondiendo de manera concreta y precisa las preguntas de los jurados evaluadores.

Que con base en los anteriores considerandos los jurados por la calificación obtenida de 100 puntos, sugieren otorgar al trabajo de grado la distinción de tesis **LAUREADA**;

Que este organismo considero viable la petición y;

ACUERDA:

PRIMERO: Otorgar la distinción de LAUREADO al Trabajo de Grado "**FASES MAGNETICAS EN CONDENSADOS DE BOSE CONFINADAS EN REDES OPTICAS**" al estudiante del Programa de Física **CHRISTIAN JESUS MADROÑERO CARVAJAL** como requisito parcial para optar al título de Físico, bajo la Asesoría de la docente **ROSARIO PAREDES** y los docentes **LUIS ANDRES SANTACRUZ Y ALVARO RUGELES**, como integrantes del Jurado Evaluador del mismo, según la parte motiva del presente acuerdo.

SEGUNDO: **COMUNÍQUESE** esta determinación compulsando las respectivas copias del presente Acuerdo al Departamento de Física, la oficina de Registro Académico y la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales.

San Juan de Pasto, octubre 10 de 2018.


HERNAN ABDÓN GARCÍA
Presidente


DUVI CASTILLO MENESES
Secretaria

Elaboró: Duvi C.

Agradecimientos

Agradezco a la Universidad de Nariño por la educación que me brindo, al departamento de física por el apoyo económico que me dió, a la Universidad Nacional Autónoma de México por aceptarme como estudiante de intercambio, al instituto de física de esta última universidad en donde realice el presente trabajo y el cual me apoyo con una beca a través del proyecto PAPIIT IN105217, Materia cuántica ultrafría: superfluidez, Turbulencia y Estados Localizados, al proyecto CONACYT 255573 el cual financió el equipo de cómputo necesario para la realización de esta tesis, a mi asesora la Dra. Rosario Paredes Gutiérrez por aceptarme como su estudiante y guiarme durante todo este proceso, al Dr Roberto Antonio Zamora Zamora y al maestro Gustavo Alexis Domínguez Castro por la ayuda que me dieron, a mi papá Audelo Isaías Madroño Calvache y mi mamá Elsa María Carvajal Paz por apoyarme siempre que lo he necesitado y por último a la persona más importante a mi hermano Diego Fernando Madroño Carvajal ya que sin su presencia en mi vida no habría llegado a donde estoy, ya que él fue quien impulso mi gusto por las matemáticas desde que era un niño y debido a esto surgió mi gusto por la física, además fue quien busco a mi asesora en México.

Este trabajo es dedicado a mi papá y a mi mamá quienes me han apoyado a cada instante de mi vida y a mi hermano que gracias él fue posible la realización de esta tesis.

Fases magnéticas en condensados de Bose confinados en redes ópticas

Resumen

El objetivo de este trabajo fue estudiar la formación de dominios magnéticos en un condensado de Bose-Einstein espinorial, confinado en una red óptica bidimensional. Para dicho propósito se analizó el estado estacionario y posteriormente la dinámica de un gas de átomos de ^{87}Rb , en sus tres estados hiperfinos, en ausencia y presencia de un campo magnético. La descripción del gas espinorial se realizó dentro del esquema de campo medio a temperatura cero, tomando en cuenta que las interacciones ocurren entre pares de partículas. Dichas consideraciones llevaron a describir al gas espinorial a través de la llamada ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). En la práctica, el estado estacionario¹ se determinó resolviendo numéricamente la ecuación de GP en tiempo imaginario en tanto que la evolución dinámica consideró la propagación de la misma ecuación en tiempo real. La resolución numérica de la citada ecuación requirió la implementación de un código numérico empleando el método Runge Kutta de cuarto orden. Se encuentra que para el caso de campo magnético cero no se forman dominios magnéticos, pero dependiendo de las condiciones iniciales se puede observar cierta magnetización, en tanto que sí se observa la formación de dominios cuando el condensado se encuentra en presencia de un campo magnético. Por último, se estudió la persistencia de los dominios formados cuando el campo magnético externo se apaga.

¹Se considera que el sistema llega al estado estacionario cuando el cambio de la energía es menor a 10^{-5}

Magnetic phases in Bose condensates confined in optical lattices

Abstract

This work was devoted to the study of the formation of magnetic domains in a spinor Bose-Einstein condensate (SBEC), confined in two-dimensional optical lattices. For this purpose we analyze the stationary state as well as the dynamics of a gas atom of ^{87}Rb in their three hyperfine states, in the absence and presence of a magnetic field. The spinor gas was described within the mean field scheme at zero temperature, taking into account that particles interact through pairs. Such considerations lead us to describe the SBEC through the so called Gross-Pitaevskii equation (GPE). The stationary state² was determined by numerically solving GPE in imaginary time, while propagation in real time was used to determine the system time dynamics. The numerical solution was done by implementing a code for the Runge Kutta method of fourth order. We found that in the case of zero magnetic field no magnetic domains are formed, while exhibiting a small magnetization as a function of the initial state. In contrast, we found that magnetic domains are formed at non zero magnetic field. We also investigate the persistence of magnetic domains when the external magnetic field is turned off.

²It is considered that the system reaches the stationary state when the energy change is less than 10^{-5}

Índice general

Título	I
Aceptación	IV
Agradecimientos	V
Dedicatoria	VI
Resumen	VII
Abstract	VIII
Índice de figuras	XI
Índice de cuadros	XII
Glosario	XIII
1. Introducción	1
2. Condensación de un gas ideal de Bose-Einstein	4
2.1. Termodinámica de un gas ideal de Bose-Einstein	5
2.2. Condensación de Bose-Einstein en un gas homogéneo	6
2.3. Condensación de Bose-Einstein en una trampa armónica	8
3. Descripción de un condensado de Bose con interacciones	11
3.1. Hamiltoniano de muchos cuerpos en segunda cuantización	11
3.2. Dispersión a bajas energías	16
3.3. Ecuación de Gross-Pitaevskii	20
4. Gas espinorial de Bose en presencia de un campo magnético	26
5. Métodos numéricos para solucionar la ecuación de Gross-Pitaevskii	42
5.1. Ecuación adimensional	42
5.2. Potencial externo y Campo magnético	46
5.3. Evolución en tiempo imaginario	47
5.4. Runge-Kutta de cuarto orden	49
6. Resultados	51
6.1. Condensado en ausencia de campo magnético	51
6.2. Condensado en presencia de campo magnético	52
6.3. Análisis	59
6.4. Conclusiones	59

Bibliografía	63
ANEXOS	66
A. Código del programa	66
A.1. Código principal	67
A.2. Códigos secundarios	83
A.2.1. Código kernelsSpin2D1a2.cu	83
A.2.2. Código kernelsPsiInicial2D.cu	91

Índice de figuras

2.1. Densidad en función de la temperatura, la parte sombreada es donde se da el fenómeno de condensación cuando se fija la densidad y se varia la temperatura.	9
3.1. Potencial efectivo de la ecuación (3.54). (a) para $l = 0$. (b) para $l > 0$	18
6.1. (a) Gráfica de la energía en evolución de tiempo imaginario. (b) Gráfica de la energía en tiempo real después de llegar al estado estacionario	52
6.2. Se muestra las respectivas gráficas de la norma al cuadrado de la función de onda inicial para cada estado hiperfino.	53
6.3. Se muestra las respectivas gráficas de la norma al cuadrado de la función de onda en el estado estacionario de cada componente de espín.	54
6.4. (a) función de onda inicial para la componente ψ_1 centrada en (2.5,0). (b) función de onda inicial para la componente ψ_{-1} centrada en (-2.5,0).	55
6.5. (a), (b), (c), funciones de onda iniciales para la componente ψ_0 centrada en (-2.5,0), (0,0) y (2.5,0) respectivamente.	56
6.6. (a), (b), (c), estado estacionario para las componentes ψ_{-1} , ψ_0 , ψ_1 , con funciones de onda iniciales centradas en (-2.5,0), (0,0) y (2.5,0) respectivamente.	57
6.7. Estado estacionario para campo magnético de 0.1 Gauss. (a) y (b) en dirección $-z$. (c) y (d) en dirección z	58
6.8. (a) y (b) estados estacionarios para los campos magnéticos dados por la ecuación 6.172 y 6.173 respectivamente	60
6.9. (a) y (b) estados estacionarios para los campos magnéticos dados por la ecuación 6.174 y 6.175 respectivamente	61

Índice de cuadros

5.1. Constantes de la ecuación adimensional.	46
--	----

Glosario

- Magnetización:** Diferencia entre las diferentes componentes de espín.
- Dominios magnéticos:** Agrupación privilegiada espacialmente de una componente de espín.
- Evolución en tiempo real:** Determinar la solución de una ecuación diferencial temporal después de un Δt dada una condición inicial.
- Evolución en tiempo imaginario:** Determinar la solución de una ecuación diferencial temporal después de un $\Delta \tau$ dada una condición inicial, habiendo antes modificado la ecuación cambiando t por $-i\tau$.
- Red óptica:** Arreglo espacial de ondas estacionarias consecuencia de haces de luz contrapropagantes.
- Gaussianas con ruido:** Se multiplica a la función Gaussiana en cada punto por números aleatorios para que de esta manera la condición inicial no tenga simetría alguna.
- Energía de recoil:** Energía asociada a una partícula puesta en un potencial óptico, el cual, es el resultado de la interferencia de dos ondas contrapropagantes de longitud de onda λ . Esta energía está dada por: $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ con m la masa de la partícula y $k = \frac{4\pi}{\lambda}$.

Capítulo 1

Introducción

Desde la realización experimental de la condensación de Bose-Einstein en 1995 [1, 2, 3] y posteriormente el gas degenerado de Fermi [4], gran parte de los experimentos de la materia ultrafría han estado encaminados al control y manipulación de muestras macroscópicas de sistemas fermiónicos y bosónicos. El éxito conseguido en esta empresa ha permitido nombrar a estos sistemas como los más limpios y “entonables”. En la actualidad estos sistemas son conocidos como simuladores cuánticos [5], debido a que es posible emular experimentalmente sistemas físicos muy diversos, cuya característica esencial es que sus propiedades cuánticas tienen una expresión macroscópica. Quizá uno de los mayores aciertos en este ámbito es el estudio y explotación que se ha hecho producto de dicho control, lo cual ha permitido estudiar los efectos del desorden en diferentes dimensiones y geometrías [6, 7, 8], el llamado cruce BEC-BCS, la dinámica de juntas de Josephson [9] y la existencia de aislantes de Mott [10] entre otros.

El propósito de esta investigación es estudiar los dominios y fases magnéticas que surgen cuando un gas de átomos de Bose en tres estados hiperfinos es confinado en una red óptica en dos dimensiones. El planteamiento de este problema surge en el contexto de los experimentos actuales en los que vapores diluidos de átomos alcalinos ultrafríos en varias componentes internas son puestos en coexistencia. Como se menciona en el párrafo anterior, aunado a la capacidad experimental de preparar estas muestras macroscópicas de átomos ultrafríos, otro logro experimental es la posibilidad de confinar estos sistemas en redes ópticas en una, dos o tres dimensiones. La combinación de los aspectos anteriores es el punto de partida dado el carácter de los materiales sólidos que exhiben fases magnéticas. El gas de átomos de ^{87}Rb en tres componentes hiperfinas, confinado en una red en dos dimensiones, representa el símil de

un sólido bidimensional con interacciones magnéticas en cada sitio. Es importante resaltar que nuestra aproximación desprecia las interacciones dipolares magnéticas de largo alcance.

El objetivo principal planteado en esta investigación es la determinación y análisis del estado estacionario del gas espinorial, como función de los parámetros que determinan la interacción entre diferentes componentes del sistema y bajo la presencia de un campo magnético externo. Particularmente se investigarán las fases magnéticas y las condiciones bajo las cuales tiene lugar la formación de dominios magnéticos. 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 llevan a describir al gas espinorial a través de la conocida ecuación de Gross-Pitaevskii (GP). Como es bien sabido, dicha ecuación describe un condensado de Bose con interacciones débiles a temperatura cero. En el desarrollo subsecuente de este trabajo veremos que dado que la ecuación de GP es de naturaleza no lineal, solo puede ser resuelta en forma numérica. Aunque este es un aspecto técnico, también ocupará parte del desarrollo de este trabajo.

Esta tesis está organizada en 6 capítulos. En el capítulo 2 se describe brevemente la condensación de Bose de un gas ideal tanto para el caso bien conocido de la literatura clásica, de un gas confinado en una caja de paredes infinitas, como para el caso de un gas confinado en un potencial armónico. La pertinencia de dicha descripción obedece al hecho que en los experimentos actuales, los gases atómicos ultrafríos se confinan en potenciales externos inhomogéneos que en buena medida se representan por potenciales de tipo armónico.

En el capítulo 3 se presenta la descripción teórica de un condensado de Bose con interacciones débiles. Para dicho propósito primero se revisa la deducción del Hamiltoniano en segunda cuantización, que describe un sistema de muchos cuerpos con interacciones entre pares de partículas. Posteriormente, en el mismo capítulo se presenta el estudio de dispersión a bajas energías. Dicho análisis permite concluir que en el límite de bajas energías la longitud de dispersión de onda s captura toda la información de la colisión entre pares. Este hecho es la base de la que se parte para terminar con un Hamiltoniano de muchos cuerpos en segunda cuantización, en el que el término de interacción queda representado por un potencial de con-

tacto, cuyo coeficiente es proporcional a la longitud de dispersión de onda s . Una vez que se tiene ese Hamiltoniano, se procede a hacer la deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii sin considerar el espín de las partículas. Este procedimiento se realiza en el esquema de Heisenberg, haciendo la aproximación que a temperatura cero se puebla el estado base del sistema. Valga la pena resaltar que dicho estado representa el estado base con interacciones, consideradas dentro de la aproximación de campo medio, de una sola partícula. Por tal motivo, se dice que la ecuación GP describe un condensado de Bose con interacciones débiles a temperatura $T = 0$.

Partiendo de la ecuación de GP obtenida en el capítulo 3, en el capítulo 4 se tiene en cuenta los grados de libertad internos de las partículas, y el hecho que estas se encontrarán en presencia de un campo magnético. Con estas nuevas consideraciones se presenta la deducción de las ecuaciones acopladas que describen un condensado de Bose espinorial en presencia de un campo magnético a temperatura cero. En el capítulo 5 se hace una adimensionalización de las ecuaciones a resolver y se aborda descripción de las herramientas numéricas que se emplearán en la resolución de las ecuaciones acopladas no lineales, las cuales son evolución en tiempo imaginario y el método Runge Kutta de cuarto orden. Finalmente, en el capítulo 6 se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones en ausencia de campo magnético con diferentes condiciones iniciales y en presencia de diferentes campos magnéticos.

Capítulo 2

Condensación de un gas ideal de Bose-Einstein

Como punto de partida se construye la función de partición que describe un gas de Bose ideal. Para trabajar con un gas monoatómico ideal se usará el ensamble gran canónico donde la función de partición es:

$$\Xi = \sum_{N,m} e^{\alpha N} e^{-\beta E_{N,m}}, \quad (2.1)$$

siendo N el número de partículas, $E_{N,m}$ es la energía del estado m de las N partículas y α , β están definidos como:

$$\alpha = \frac{\mu}{KT}, \quad \beta = \frac{1}{KT}, \quad (2.2)$$

donde μ es el potencial químico, K la constante de Boltzmann y T la temperatura. Ahora teniendo en cuenta la restricción $N = \sum_m n_m$ y que $E_{N,m} = \sum_m \varepsilon_m n_m$, siendo ε_m la energía del estado m de una sola partícula, se puede modificar la ecuación (2.1) para llevarla a la siguiente forma:

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_m}^* \prod_m e^{(\alpha - \beta \varepsilon_m) n_m}, \quad (2.3)$$

donde el asterisco en la sumatoria representa la restricción antes mencionada. Por último la ecuación anterior es equivalente a:

$$\Xi = \prod_m \left(\sum_{n_m}^{n_{max}} e^{(\alpha - \beta \varepsilon_m) n_m} \right), \quad (2.4)$$

siendo n_{max} el número máximo de ocupación de un determinado estado m de una partícula. Ya que se va a trabajar con bosones se tiene que $n_{max} = \infty$. Además la serie converge puesto

que $e^{(\alpha-\beta\varepsilon_m)} \ll 1$, obteniendo así la forma final de la función de partición,

$$\Xi = \prod_m \frac{1}{1 - e^{(\alpha-\beta\varepsilon_m)}}. \quad (2.5)$$

Sabiendo que el gran potencial está dado por: $\Omega = -KT \ln \Xi$ [11],

$$\Omega = KT \sum_m \ln (1 - e^{(\alpha-\beta\varepsilon_m)}), \quad (2.6)$$

de donde es posible determinar las propiedades termodinámicas [11],

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T}, \quad N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}, \quad p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V}. \quad (2.7)$$

2.1. Termodinámica de un gas ideal de Bose-Einstein

En el presente trabajo se tratará con gases monoatómicos. En este caso se tiene un gas ideal encerrado en una caja de lado l , donde se reemplaza el índice mudo m por \vec{p} , el cual representa que la energía del estado m de una sola partícula, corresponde a la energía cinética de la misma dentro de la caja, la cual esta dada por:

$$\varepsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (2.8)$$

donde $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ siendo h la constante de Planck y k_i está relacionado con la longitud de la caja de la siguiente forma: $k_i = \frac{n_x \pi}{l}$ con n_x tomando valores en los enteros positivos, así la ecuación (2.6) para este caso será:

$$\Omega = KT \sum_{\vec{p}} \ln (1 - e^{(\alpha-\beta\varepsilon_{\vec{p}})}), \quad (2.9)$$

para proceder, en el límite termodinámico se puede convertir la sumatoria en una integral pasando de sumar en los estados a integrar en la densidad de estados,

$$\Omega = \frac{4\pi KTV}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \ln \left(1 - e^{(\alpha-\beta \frac{p^2}{2m})} \right), \quad (2.10)$$

siendo V el volumen de la caja que contiene al gas, trabajando la expresión se la puede dejar de la siguiente forma:

$$\Omega = -KT \frac{V}{\lambda^3} g_{\frac{5}{2}}(\alpha), \quad (2.11)$$

donde λ y $g_n(\alpha)$ se definen como:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mKT}} \quad , \quad g_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^{x-\alpha} - 1}. \quad (2.12)$$

Partiendo de la ecuación (2.9) y usando (2.7), se puede calcular el número de partículas, el cual está dado por la expresión,

$$N = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\vec{p}}-\alpha} - 1}, \quad (2.13)$$

comparándolo con la expresión $N = \sum_{\vec{p}} n_{\vec{p}}$ donde $n_{\vec{p}}$ es el número medio de partículas en el estado \vec{p} de una sola partícula, este se puede deducir de la ecuación anterior,

$$n_{\vec{p}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\vec{p}}-\alpha} - 1}. \quad (2.14)$$

Analizando la ecuación (2.14), el número de partículas en un estado \vec{p} no puede ser negativo lo cual conlleva a que el denominador debe ser mayor que cero, es decir, $\beta\varepsilon_{\vec{p}} > \alpha$, para todo $\varepsilon_{\vec{p}}$. Para que esto se cumpla α debe ser menor que ε_0 , pero $\alpha = \frac{\mu}{KT}$, entonces se llega a la conclusión que para un gas de bosones el potencial químico siempre debe ser negativo. Por último para que el gas sea diluido se debe cumplir que $n_p \ll 1$, lo cual conlleva a que $e^{-\alpha} \gg 1$, si se aplica esta condición en la definición de $g_n(\alpha)$ se puede demostrar que: $g_n(\alpha) \approx e^\alpha$. Entonces en el caso diluido se tiene que:

$$\Omega = -KT \frac{V}{\lambda^3} e^\alpha, \quad S = \frac{KT}{\lambda^3} e^\alpha \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{KT} \right), \quad N = \frac{V}{\lambda^3} e^\alpha, \quad p = \frac{KT}{\lambda^3} e^\alpha. \quad (2.15)$$

2.2. Condensación de Bose-Einstein en un gas homogéneo

La condición para que el gas sea degenerado, es decir, sus partículas ocupan de forma múltiple el estado \vec{p} de una sola partícula ($n_{\vec{p}} \gg 1$), lo cual es equivalente a $e^{-\alpha} \ll 1$.

Cuando se trabajó el gran potencial se convirtió la sumatoria en una integral despreciando el primer término $\vec{p} = 0$ lo cual no afecta en el caso del gas diluido, ya que en este $e^{-\alpha} \gg 1$ y el primer término es despreciable, pero ahora hay que tener en cuenta este término. Partiendo de la ecuación (2.13) se escribe el primer término explícitamente, que corresponde al número de partículas en el estado $\vec{p} = 0$ y los estados $\vec{p} \neq 0$,

$$N = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\vec{p}=0}-\alpha} - 1} + \sum_{\vec{p} \neq 0} \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\vec{p}}-\alpha} - 1}, \quad (2.16)$$

donde se identificará el primer término como N_0 , el número de partículas con energía ε_0 y usando la ecuación (2.11) para gran potencial se puede escribir el número de partículas como:

$$N = N_0 + \frac{V}{\lambda^3} g_{\frac{3}{2}}(\alpha). \quad (2.17)$$

Esta última ecuación es clave para identificar la transición a la fase condensada. Se mantiene la densidad $\left(\frac{N}{V}\right)$ fija, si se baja la temperatura para que esta densidad siga constante α debe aumentar su valor así entre más baje la temperatura más subirá α , que en el fondo quiere decir que μ crezca, pero como se demostró μ no puede ser positivo. Entonces se define T_0 como la temperatura a la cual $\mu = 0$ de la siguiente manera,

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda^3(T_0)} g_{\frac{3}{2}}(0) \Rightarrow T_0 = \frac{h^2}{2\pi mK} \left(\frac{1}{g_{\frac{3}{2}}(0)} \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (2.18)$$

a esta temperatura se le llama temperatura crítica ya que para valores menores de temperatura se obtiene el fenómeno de condensación. Además, el potencial químico se interpreta físicamente como el cambio de energía del sistema al agregarle una partícula al mismo. En este caso $\mu = 0$ lo cual significa que el sistema no cambiará de energía al introducirle más partículas, por esta razón las partículas que se introduzcan en el sistema se ubicarán en el estado base. El valor de $g_{\frac{3}{2}}(0)$ se puede calcular desde la definición de esta función y equivale a: 2,612. Para proceder se analizará, qué pasa si $T < T_0$, se tiene que $\mu = 0$ ya que este no puede ser positivo, con esto en mente, usando las ecuaciones (2.17) y (2.18) se puede encontrar el número de partículas en el estado $\vec{p} = 0$ el cual estará dado por:

$$N_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right), \quad (2.19)$$

en esta ecuación es donde se puede observar el fenómeno de condensación debido a que para $T < T_0$ se puede observar una ocupación masiva del estado de mínima energía.

2.3. Condensación de Bose-Einstein en una trampa armónica

La diferencia del tratamiento anterior es que ahora la energía del estado m de una partícula está dado por:

$$\varepsilon_m = \varepsilon_{i,j,k} = \hbar\omega (i + j + k), \quad (2.20)$$

entonces la ecuación para el gran potencial (2.6), ahora será:

$$\Omega = KT \sum_{i,j,k} \ln (1 - e^{(\alpha - \beta\hbar\omega(i+j+k))}), \quad (2.21)$$

nuevamente, en el límite termodinámico, se convierte la sumatoria en una integral la cual se la puede llevar a la forma [12]:

$$\Omega = -KT \left(\frac{KT}{\hbar\omega} \right)^3 g_4(\alpha). \quad (2.22)$$

Para determinar la temperatura a la cual ocurre la condensación, se puede hacer un análisis similar al anterior. Manteniendo N fijo y variando T , se define T_0 como la temperatura a la cual $\mu = 0$ de la siguiente forma:

$$\frac{N}{\left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^3} = (KT_0)^3 g_3(0) \quad \Rightarrow \quad T_0 = \frac{\hbar\omega}{K} \left(\frac{N}{g_3(0)} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.23)$$

entonces se puede deducir el número de ocupación en el estado de mínima energía de una partícula el cual estará dado por:

$$N_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^3 \right), \quad (2.24)$$

de nuevo se logra ver el fenómeno de condensación. En la figura (2.1) se ilustra la ocurrencia de la condensación de Bose-Einstein para el caso del gas inhomogéneo. En esta se tiene la

densidad en función de la temperatura, donde se ha fijado una densidad la cual determina T_0 , la parte sombreada es donde se encontrará el condensado. Lo anterior puede hacer pensar que la ocurrencia de la condensación solo depende de la densidad que se fijo y de la temperatura definida como T_0 pero cabe resaltar que la ocurrencia de la condensación también está determinada por la convergencia de la función $g_n(\alpha)$ en $\alpha = 0$, ya que si esta diverge no ocurrirá la condensación. Ahora la función $g_n(\alpha)$ está determinada por la dimensionalidad del problema y el potencial de confinamiento, entonces se puede concluir que la ocurrencia de la condensación también dependerá de estas dos últimas características. Un ejemplo de esto es el caso de un gas en una caja unidimensional de longitud L , ya que al realizar los cálculos se obtiene la siguiente relación para el número de partículas,

$$N = \frac{L}{\lambda} g_{\frac{1}{2}}(\alpha), \quad (2.25)$$

este depende de $g_{\frac{1}{2}}(\alpha)$, la cual diverge en $\alpha = 0$ por lo tanto no se dará la condensación.

El tratamiento anterior fue realizado para un gas ideal de bosones, es decir despreciando

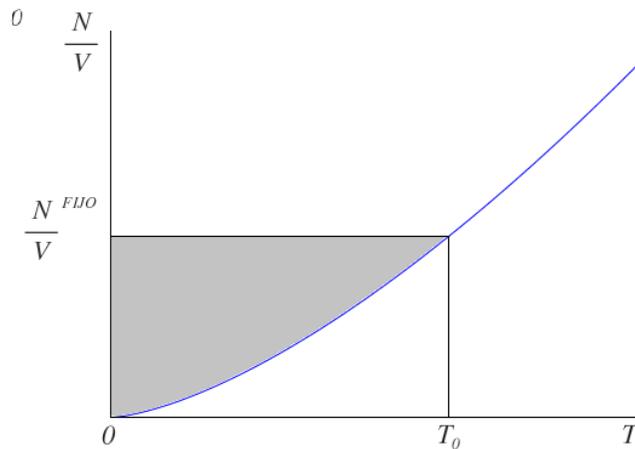


Figura 2.1: Densidad en función de la temperatura, la parte sombreada es donde se da el fenómeno de condensación cuando se fija la densidad y se varia la temperatura.

las interacciones entre átomos, por lo cual el Hamiltoniano solo tenía el término de energía cinética y en el caso del potencial armónico la debido al potencial externo sin embargo, aun

en el caso de un gas diluido el efecto de las interacciones entre partículas no se puede despreciar, la descripción de un gas real demanda considerar este aspecto. A continuación se hará la descripción de la condensación de Bose de un gas con interacciones. El punto de partida es el Hamiltoniano de un sistema de N partículas interactuantes.

Capítulo 3

Descripción de un condensado de Bose con interacciones

3.1. Hamiltoniano de muchos cuerpos en segunda cuantización

El Hamiltoniano que describe un sistema de N cuerpos interactuantes en un potencial externo está dado por [13]:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + V_{ext}(\hat{x}_k) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N V(\hat{x}_k - \hat{x}_l), \quad (3.26)$$

donde el primer término tiene la energía cinética y la debido al potencial externo. El segundo término es la energía debido a la interacción entre pares de partículas. Se puede reescribir el Hamiltoniano anterior de la siguiente manera,

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{H}_0(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N V(\hat{x}_k - \hat{x}_l), \quad (3.27)$$

donde se identifica el primer término como \hat{H}_0 , siendo este el Hamiltoniano de una sola partícula. El cual está dado por:

$$\hat{H}_0(x_k) = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + V_{ext}(\hat{x}_k). \quad (3.28)$$

En la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (3.29)$$

se puede expresar la función de onda de las N partículas en términos de las funciones de onda de una sola partícula $\psi_{E_k}(x_k)$, la cual es auto función de $\hat{H}_0(x_k)$ dado por (3.28) (Siendo

E_k un conjunto de números cuánticos que describen el estado k de una sola partícula) de la siguiente manera:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \sum_{E_1, E_2, \dots, E_N} C(E_1, E_2, \dots, E_N, t) \psi_{E_1}(x_1) \psi_{E_2}(x_2) \dots \psi_{E_N}(x_N), \quad (3.30)$$

introduciendo la definición anterior en la ecuación (3.29), multiplicando por la derecha por $\psi_{E_1}^*(x_1) \psi_{E_2}^*(x_2) \dots \psi_{E_N}^*(x_N)$ e integrando sobre todas las coordenadas, se tiene la siguiente relación:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(E_1, E_2, \dots, E_N, t) &= \sum_{k=1}^N \sum_{E_w} \int dx_k \psi_{E_w}^*(x_k) \hat{H}_0(x_k) \psi_{E_k}(x_k) \\ &\times C(E_1, \dots, E_{k-1}, E_w, E_{k+1}, \dots, E_N, t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_{E_w} \sum_{E_{w'}} \iint dx_k dx_l \psi_{E_w}^*(x_k) \psi_{E_{w'}}^*(x_l) V(\hat{x}_k - \hat{x}_l) \psi_{E_k}(x_k) \psi_{E_l}(x_l) \\ &\times C(E_1, \dots, E_{k-1}, E_w, E_{k+1}, \dots, E_{l-1}, E_{w'}, E_{l+1}, \dots, E_N, t), \end{aligned} \quad (3.31)$$

esto es porque $\hat{H}_0(x_k)$ solo actúa sobre las coordenadas x_k y la constante que depende de los números cuánticos E_w que serán cambiados por las $\delta_{k,w}$. El único que no será cambiado es el que corresponda a la partícula que tiene las mismas coordenadas x_k . De manera similar ocurre con el potencial, el cual solo actúa sobre las coordenadas x_k y x_l . Por otro lado, debido a que se está trabajando con bosones se sabe que la función $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$ debe ser simétrica bajo permutación de dos partículas; esta simetría recae en las constantes C . Además, el estado k de una partícula puede estar ocupado más de una vez, por lo cual el conjunto de números cuánticos E_k se repetirán tantas veces como este ocupado dicho estado. Debido a esto se puede poner la constante en dependencia de n_k , el cual es el número de ocupación del estado k de una sola partícula. De esta manera $C(E_1, E_2, \dots, E_N, t) = C'(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)$. Ya que se tiene un coeficiente que depende del número de ocupación de los estados de una sola partícula, se puede pensar en expresar Ψ de la siguiente manera:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) \Phi_{n_1, n_2, \dots, n_\infty}(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (3.32)$$

como se puede ver el coeficiente $f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)$ es simétrico bajo la permutación de dos partículas, entonces $\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_\infty}(x_1, x_2, \dots, x_N)$ también debe ser una función simétrica, que describa un sistema de N partículas idénticas, la cual está dada por [14]:

$$\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_\infty}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} \sum_P \hat{P} \psi_{E_1}(x_1) \psi_{E_2}(x_2) \dots \psi_{E_N}(x_N), \quad (3.33)$$

la cual es ortonormal. Entonces el coeficiente $C(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)$ está dado por:

$$C(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_\infty!}{N!}} f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t), \quad (3.34)$$

así la ecuación (3.31) para C' se puede escribir como:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C'(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) &= \sum_{k=1}^N \sum_{E_w} \langle E_w | \hat{H}_0 | E_k \rangle \\ &\times C'(n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_w + 1, \dots, n_\infty, t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_{E_w} \sum_{E_{w'}} \langle E_w, E_{w'} | V | E_k, E_l \rangle \\ &\times C'(n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_w + 1, \dots, n_l - 1, \dots, n_{w'} + 1, \dots, n_\infty, t), \end{aligned} \quad (3.35)$$

por tal razón se puede interpretar que el estado k ocurre una vez menos que el w . Ahora, si E_k se repite en la suma, es decir que se tiene el mismo conjunto de números cuánticos para diferentes partículas (esto ocurre n_E veces). Entonces se puede pasar de sumar sobre k a sumar sobre E . Para la parte del potencial se debe tener en cuenta si $E = E'$ o $E \neq E'$. entonces se tiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C'(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) &= \sum_E \sum_W n_E \langle W | \hat{H}_0 | E \rangle \\ &\times C'(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_\infty, t) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_E \sum_{E'} \sum_W \sum_{W'} n_E (n_{E'} - \delta_{E, E'}) \langle W, W' | V | E, E' \rangle \\ &\times C'(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_{E'} - 1, \dots, n_{W'} + 1, \dots, n_\infty, t), \end{aligned} \quad (3.36)$$

donde se ha llamado E a E_k , E' a E_l , W a E_w y W' a $E_{w'}$. Usando la ecuación (3.34) en la anterior expresión, se tiene ahora una expresión para f [13],

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) &= \sum_E n_E \langle E | \hat{H}_0 | E \rangle f(n_1, \dots, n_E, \dots, n_\infty, t) \\
 &+ \sum_{E \neq W} \sqrt{n_E} \sqrt{n_W + 1} \langle W | \hat{H}_0 | E \rangle f(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_\infty, t) \\
 &+ \sum_{E \neq E' \neq W \neq W'} \frac{1}{2} \sqrt{n_E} \sqrt{n_{E'}} \sqrt{(n_W + 1)} \sqrt{(n_{W'} + 1)} \langle W, W' | V | E, E' \rangle \\
 &\times f(n_1, \dots, n_E - 1, \dots, n_W + 1, \dots, n_{E'} - 1, \dots, n_{W'} + 1, \dots, n_\infty, t) + \dots
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Puesto que se está trabajando con bosones, usaremos una notación donde el estado de las N partículas está caracterizado por el número de ocupación de cada estado k de una partícula denotado por n_k . Ahora se debe escoger un orden de los estados, el cual puede ser arbitrario, pero fijo, se escoge en orden ascendente de las energías, es decir el estado base k_1 , el primer estado excitado k_2 y así sucesivamente. Entonces un estado de las N partículas puede escribirse como:

$$|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_\infty\rangle, \tag{3.38}$$

siendo $|n_k\rangle$ el estado de una sola partícula. Ahora este conjunto de estados obedece las relaciones de ortonormalidad y completéz,

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty | n_1, n_2, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n'_1, n_1} \delta_{n'_2, n_2} \dots \delta_{n'_\infty, n_\infty} \tag{3.39}$$

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_\infty| = 1, \tag{3.40}$$

por lo tanto, a este conjunto de estados se le llamará la base del número de ocupación. Ahora $\Psi(t)$ en esta base se la expresa de la siguiente manera:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle. \tag{3.41}$$

Se define los operadores de creación, aniquilación y número, de tal manera que al aplicarlos sobre un estado se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}\hat{b}_k^\dagger |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |n_1, \dots, n_k + 1, \dots, n_\infty\rangle, \\ \hat{b}_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle &= \sqrt{n_k} |n_1, \dots, n_k - 1, \dots, n_\infty\rangle, \\ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle &= n_k |n_1, \dots, n_k, \dots, n_\infty\rangle,\end{aligned}\quad (3.42)$$

consistentemente se define el operador de número de la siguiente manera: $\hat{N}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k$. Además, estos operadores cumplen las relaciones de conmutación,

$$\begin{aligned}[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] &= \delta_{k,k'}, \\ [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger] &= [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = 0,\end{aligned}\quad (3.43)$$

ahora si se introduce $\Psi(t)$ definida en (3.41) en la ecuación de Schrödinger. Con la expresión para $f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)$ (3.37) y la definición de los operadores de creación y aniquilación (3.42) se puede llegar a la siguiente expresión para $\Psi(t)$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \left[\sum_{i,j} \hat{b}_j^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | V | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l \right] |\Psi(t)\rangle, \quad (3.44)$$

de aquí se concluye que el Hamiltoniano en términos de los operadores de creación y aniquilación se expresa de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger \langle i, j | V | k, l \rangle \hat{b}_k \hat{b}_l. \quad (3.45)$$

Los términos de este Hamiltoniano se pueden interpretar como: el primer término es la energía de las partículas libres, mientras que el segundo término es la energía de interacción entre partículas. El cual a su vez puede ser interpretado como: dos partículas que están en los estados k, l y debido a la influencia del potencial V se dispersan en dos partículas ahora en los estados i, j y la amplitud de probabilidad de que esto suceda esta dada por $V_{i,j;k,l} = \langle i, j | V | k, l \rangle$, es decir,

$$V_{i,j;k,l} = \int d^3r \int d^3r' \psi_i^*(\vec{r}, t) \psi_j^*(\vec{r}', t) V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \psi_k(\vec{r}, t) \psi_l(\vec{r}', t). \quad (3.46)$$

Para conocer esta amplitud se necesita conocer el potencial de interacción $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, el cual será tratado en la siguiente sección.

3.2. Dispersión a bajas energías

Para poder seguir con el análisis es necesario conocer el potencial $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$, en esta sección se harán algunas aproximaciones para deducir la expresión de este. La primera de estas suposiciones es que debido a que se está trabajando con gases diluidos la interacción entre partículas solo se va a dar entre pares, por lo cual se analizará la dispersión de dos partículas. El Hamiltoniano para un sistema de dos partículas interactuantes es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r} - \vec{r}'|), \quad (3.47)$$

donde se tiene la energía cinética de cada partícula y la energía de interacción entre las dos partículas. Este Hamiltoniano se puede separar si se pasa a coordenada centro de masa y coordenada relativa. El Hamiltoniano de interés es el de la coordenada relativa $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + V(r), \quad (3.48)$$

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

$$\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \Psi + V(r) \Psi = E \Psi, \quad (3.49)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) &= e^{ikz} + \Psi_{dis}(r, \theta), \\ \Psi(r, \theta) &= e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

se puede desarrollar e^{ikz} en polinomios de Legendre, ya que en coordenadas esféricas $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta}$,

$$e^{ikz} = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2ikr} P_l(\cos \theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos \theta). \quad (3.51)$$

Además se propone $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} D_l P_l(\cos\theta)$, entonces se puede reescribir (3.50) como:

$$\Psi(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)i^l}{2ikr} \left[(-i)^l + \frac{D_r}{r} \right] P_l(\cos\theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(-1)^l}{2ikr} P_l(\cos\theta), \quad (3.52)$$

manteniendo la condición de que la onda incidente tiene dirección z , la solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el Hamiltoniano (3.48) en esféricas se puede expresar como:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_l(r) P_l(\cos\theta), \quad (3.53)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r), \quad (3.54)$$

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

$$R_{kl}(r) = \frac{\text{sen} \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right)}{kr}, \quad (3.55)$$

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

$$\Psi(r, \theta) = e^{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (-i)^l e^{i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos\theta) - e^{-ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l (i)^l e^{-i\delta_l}}{2ikr} P_l(\cos\theta), \quad (3.56)$$

igualando las ecuaciones (3.52) y (3.56) se puede llegar a,

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} P_l(\cos\theta), \quad (3.57)$$

ahora analizando la ecuación (3.54) para $R(r)$, en alusión a la mecánica clásica se puede graficar un potencial efectivo $V_{ef}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$, para $l = 0$ (figura 3.1 a) y para $l \neq 0$ (figura 3.1 b). Entonces si una partícula lleva una energía menor que la barrera esta no será afectada por el potencial $V(r)$, por lo tanto, solo las ondas con $l = 0$ serán dispersadas por el potencial $V(r)$. Debido a esto,

$$f(\theta) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \text{sen}\delta_0, \quad (3.58)$$

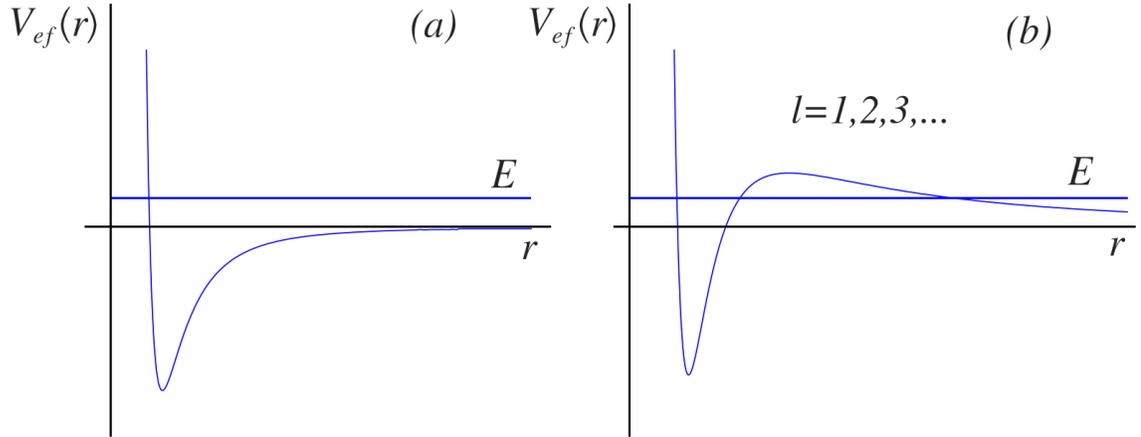


Figura 3.1: Potencial efectivo de la ecuación (3.54). (a) para $l = 0$. (b) para $l > 0$.

y la función de onda dispersada será:

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = \frac{\text{sen}\delta_0}{kr} e^{i(kr+\delta_0)}, \quad (3.59)$$

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

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan\delta_0}{k} = -a, \quad (3.60)$$

para continuar se toma el límite cuando $k \rightarrow 0$ entonces $|ka| \ll 1$, $\delta_0 \approx ka$ y $\text{sen}\delta_0 \approx ka$, por lo cual, la ecuación (3.59) se puede reescribir como:

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = -\frac{a}{r} e^{ik(r+a)}. \quad (3.61)$$

Recordando que el objetivo inicial es encontrar una expresión para el potencial $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$. Se tomará la transformada de Fourier (TF) de la ecuación (3.49). Antes de hacerlo se recuerda la definición de la TF

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \int_v d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) \quad (3.62)$$

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

de Fourier,

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{v} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tilde{f}(\vec{k}) \quad (3.63)$$

porque para este caso \vec{k} varia de forma discreta. Con esto en mente la TF de (3.49) será

$$-\frac{\hbar^2 k'^2}{m} \tilde{\Psi}(k') + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}(k'') = E \tilde{\Psi}(k'), \quad (3.64)$$

donde v es el volumen en el que está contenido el gas. La energía está dada por $E = \frac{\hbar^2 k^2}{m}$ y por último se toma la TF de $\Psi(r, \theta)$ dada por la ecuación (3.50), obteniendo así la siguiente ecuación para $\Psi_{dis}(r, \theta)$,

$$\tilde{V}(k' - k'') + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \tilde{\Psi}_{dis}(k'') = \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{m} - \frac{\hbar^2 k''^2}{m} \right] \tilde{\Psi}_{dis}(k'), \quad (3.65)$$

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

$$\tilde{\Psi}_{dis}(k') = \frac{1}{E_k - E_{k'} - i\delta} T(k', k; E_k), \quad (3.66)$$

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

$$T(k', k; E_k) = \tilde{V}(k' - k) + \frac{1}{v} \sum_{k''} \tilde{V}(k' - k'') \frac{1}{E_k - E_{k''} - i\delta} T(k'', k; E_k), \quad (3.67)$$

ahora se toma la transformada inversa de (3.66) y se hace tender el volumen a infinito para convertir la suma sobre k a una integral de variable continua.,

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \frac{e^{ik'\cdot r}}{E_k - E_{k'} - i\delta} T(k', k; E_k), \quad (3.68)$$

como se está trabajando a bajas energías $E_k \rightarrow 0$ y $k \rightarrow 0$, entonces se puede hacer la siguiente aproximación $T(k', k; E_k) \approx T(0, 0, 0)$ obteniendo así una solución aproximada para la ecuación (3.49),

$$\Psi_{dis}(r, \theta) = -\frac{m}{4\pi\hbar^2 r} T(0, 0, 0), \quad (3.69)$$

igualando las soluciones (3.69) y (3.61) se puede deducir que:

$$T(0, 0, 0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \quad (3.70)$$

desde la ecuación (3.67) para la matriz de dispersión se puede hacer la siguiente aproximación,

$$\begin{aligned} T(0, 0, 0) &\approx \tilde{V}(0), \\ \tilde{V}(0) &= \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

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

$$V(r) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(r). \quad (3.72)$$

Esta última ecuación es primordial para abordar la descripción de un condensado de Bose con interacciones, en particular este trabajo tiene como objetivo principal el estudio de un gas de Bose en tres estados hiperfinos y las posibles fases que resultan cuando se le confina en un potencial externo dado. El punto de partida es la ecuación de Gross-Pitaevskii que describe la dinámica de un condensado con interacciones a temperatura $T = 0$, la cual será tratada a continuación.

3.3. Ecuación de Gross-Pitaevskii

Para proceder se reescribirá el Hamiltoniano en segunda cuantización dado por (3.45), en términos de los operadores de campo de aniquilación y creación. Dichos operadores son:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= \sum_{k=0} \psi_k(\vec{r}, t) \hat{b}_k, \\ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_{k=0} \psi_k^*(\vec{r}, t) \hat{b}_k^\dagger, \end{aligned} \quad (3.73)$$

donde $\psi_k(\vec{r}, t)$ son las funciones de onda de una sola partícula, las cuales son auto funciones de \hat{H}_0 . Estos operadores cumplen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \right] &= \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \\ \left[\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \right] &= 0, \\ \left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \right] &= 0, \end{aligned} \quad (3.74)$$

entonces el Hamiltoniano dado por la ecuación (3.45) se puede escribir como:

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}', t), \quad (3.75)$$

usando el resultado obtenido para el potencial en la sección anterior ecuación (3.72), se reemplaza $V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = g\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ (donde $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$) en la expresión anterior, obteniendo:

$$\hat{H} = \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + \frac{g}{2} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (3.76)$$

con este Hamiltoniano se calcula la ecuación de Heisenberg para el operador de campo $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$,

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}], \quad (3.77)$$

para calcular el conmutador, se dividirá \hat{H} en dos términos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \\ \hat{H}_1 &= \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \\ \hat{H}_2 &= \frac{g}{2} \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (3.78)$$

entonces el conmutador en cuestión, se partirá en dos,

$$[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}_1] + [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}_2], \quad (3.79)$$

a continuación, se calculará el primer conmutador,

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

usando las relaciones de conmutación (3.74) se puede deducir que:

$$\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.80)$$

se reemplaza esto en el segundo término,

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

entonces el primer conmutador será:

$$\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}_1 \right] = \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \quad (3.81)$$

ahora se calculará el segundo conmutador,

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

a continuación, se trabajará sobre la segunda integral usando la relación (3.80),

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

entonces se obtiene,

$$\left[\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}_2 \right] = g \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \quad (3.82)$$

con los resultados (3.81) y (3.82), la ecuación de Heisenberg (3.77) será:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (3.83)$$

Lo que se quiere, es describir un gas a temperatura cero ($T = 0$). Se sabe que para esta condición la gran mayoría de las partículas ocupan el estado base de una partícula denotado

por $\psi_0(\vec{r}, t)$, entonces los operadores de se pueden aproximar por:

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}(\vec{r}, t) &\approx \psi_0(\vec{r}, t)\hat{b}_0, \\ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) &\approx \psi_0^*(\vec{r}, t)\hat{b}_0^\dagger,\end{aligned}\quad (3.84)$$

sustituyendo esto en la ecuación de Heisenberg antes deducida (3.83) se tiene,

$$\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(\vec{r}, t)\hat{b}_0 = \left[\hat{H}_0 + g\psi_0^*(\vec{r}, t)\psi_0(\vec{r}, t)\hat{b}_0^\dagger\hat{b}_0 \right] \psi_0(\vec{r}, t)\hat{b}_0, \quad (3.85)$$

lo cual es equivalente a:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_0(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + g|\psi_0(\vec{r}, t)|^2N_0 \right] \psi_0(\vec{r}, t), \quad (3.86)$$

debido a que en el límite termodinámico los operadores de creación y aniquilación se pueden reemplazar por $\sqrt{N_0}$. Esta última expresión es la ecuación de Gross-Pitaevskii, la cual describe un condensado de Bose-Einstein con interacciones a temperatura cero. Por otro lado, se puede determinar la energía asociada un estado cualquiera $\Psi(\vec{r}, t)$ calculando el valor esperado del Hamiltoniano del sistema en este estado, el cual está dado por la ecuación (3.27), reemplazando el potencial de interacción por la expresión (3.72). Entonces la energía será:

$$E = \int d^{3N}r \Psi^*(\vec{r}, t) \left[\sum_{k=1}^N \hat{H}_0(\vec{r}_k) + \frac{g}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \delta(\vec{r}_l - \vec{r}_k) \right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.87)$$

siendo $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$. El estado $\Psi(\vec{r}, t)$ se puede escribir como el producto de funciones de onda asociadas a cada partícula del sistema, es decir, $\Psi(\vec{r}, t) = \prod_{i=1}^N \psi(\vec{r}_i, t)$, reemplazando esto en la ecuación (3.87) se tiene,

$$\begin{aligned}E &= \int d^{3N}r \prod_{i=1}^N \psi^*(\vec{r}_i, t) \sum_{k=1}^N \hat{H}_0(\vec{r}_k) \prod_{j=1}^N \psi(\vec{r}_j, t) \\ &+ \frac{g}{2} \int d^{3N}r \prod_{i=1}^N \psi^*(\vec{r}_i, t) \sum_{k \neq l=1}^N \delta(\vec{r}_l - \vec{r}_k) \prod_{j=1}^N \psi(\vec{r}_j, t),\end{aligned}\quad (3.88)$$

puesto que en el primer término el Hamiltoniano (\hat{H}_0) solo actúa sobre la coordenada \vec{r}_k y en el segundo término la delta es diferente de cero cuando $\vec{r}_l = \vec{r}_k$ se tiene que la energía es:

$$E = N \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t)\hat{H}_0(r)\psi(\vec{r}, t) + \frac{g}{2}N(N-1) \int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^4, \quad (3.89)$$

ya que N es muy grande se puede hacer la aproximación $N - 1 \approx N$ y entonces se puede reescribir como:

$$E = N \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \left[\hat{H}_0 + \frac{gN}{2} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \psi(\vec{r}, t), \quad (3.90)$$

Capítulo 4

Gas espinorial de Bose en presencia de un campo magnético

En la sección anterior se hizo el tratamiento sin considerar el espín de las partículas. Ahora, se considerará el hecho de que las partículas poseen este grado de libertad extra, el cual se manifiesta en presencia de un campo magnético externo. Por lo cual el Hamiltoniano dado por (3.76) se modificará y en consecuencia también lo hará la ecuación de Gross-Pitaevskii (3.86). A continuación, se hará el respectivo tratamiento. De la teoría de momento angular se tiene:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= \vec{L} + \vec{S}, \\ \vec{F} &= \vec{I} + \vec{J}, \\ |I - J| &\leq F \leq I + J,\end{aligned}\tag{4.91}$$

siendo \vec{L} el momento angular, \vec{S} es el espín del electrón, \vec{I} es el espín nuclear. Para este tratamiento $L = 0$ porque solo se considera dispersión de ondas, $I = 3/2$ para átomos de ^{87}Rb y $S = 1/2$. Entonces $F = 1, 2$, este tratamiento hará para el canal $F = 1$. A continuación se verá cómo se modifica el primer término del Hamiltoniano (3.45), es decir, cómo cambia el \hat{H}_0 en presencia de un campo magnético debido a los grados de libertad internos que se están teniendo en cuenta. El término que se le debe agregar al \hat{H}_0 es:

$$\hat{H}_z = a\vec{I}\cdot\vec{J} - \vec{\mu}\cdot\vec{B},\tag{4.92}$$

donde el primer término representa la interacción del espín nuclear con espín-orbita, siendo a una diferencia de energía y el segundo término representa la interacción de espín con el campo magnético donde $\vec{\mu}$ está dado por $\vec{\mu} = \mu_B g_I \vec{I} - \mu_B g_J \vec{J}$, siendo μ_B el magnetón

de Bohr. La interacción del momento angular con el campo magnético no se considera porque se está trabajando con ondas. Ahora se quiere encontrar una base para representar este Hamiltoniano, la base adecuada será $|m_J; m_I\rangle$ es decir sus elementos serán:

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle, \\ & \left| -\frac{1}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.93)$$

pero de estos 8 elementos 5 son de $F = 2$, se puede ver que $|\frac{1}{2}; \frac{3}{2}\rangle$ y $|\frac{1}{2}; -\frac{3}{2}\rangle$ tienen $m_F = 2$ y $m_F = -2$ por lo cual se los descarta. Los 6 restantes tienen $m_F = -1, 0, 1$. Entonces se escoge la base para encontrar en esta los autovalores de \hat{H}_z , la cual se denota de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} |+\rangle & \equiv \left| m_J = \frac{1}{2}; m_I = m_F - \frac{1}{2} \right\rangle, \\ |-\rangle & \equiv \left| m_J = -\frac{1}{2}; m_I = m_F + \frac{1}{2} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.94)$$

con $m_F = -1, 0, 1$. Antes de calcular los elementos de matriz de \hat{H}_z con esta base se reescribe el Hamiltoniano en términos de $\hat{I}_+, \hat{I}_-, \hat{J}_+, \hat{J}_-$ de la siguiente manera:

$$\hat{H}_z = \frac{a}{2}(\hat{I}_+\hat{J}_- + \hat{I}_-\hat{J}_+) + a\hat{I}_z\hat{J}_z + b\hat{J}_z + c\hat{I}_z, \quad (4.95)$$

donde $b = \mu_B g_J B$, $c = -\mu_B g_I B$ y se ha colocado el campo magnético en dirección z ($\vec{B} = B\hat{k}$). Además hay que recordar cómo actúan los operadores de momento angular $\hat{L}_+, \hat{L}_-, \hat{L}_z$ sobre $|L, m_L\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{L}_\pm |L, m_L\rangle & = \sqrt{(L \mp m_L)(L \pm m_L + 1)} |L, m_L \pm 1\rangle, \\ \hat{L}_z |L, m_L\rangle & = m_L |L, m_L\rangle, \end{aligned} \quad (4.96)$$

con esto en mente, se puede llegar a la forma matricial de \hat{H}_z es:

$$\hat{H}_z = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} \left(m_F - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} (b - c) + c m_F & \frac{a}{2} \left[\left(I + \frac{1}{2} \right)^2 - m_F^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ \frac{a}{2} \left[\left(I + \frac{1}{2} \right)^2 - m_F^2 \right]^{\frac{1}{2}} & -\frac{a}{2} \left(m_F + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} (b - c) + c m_F \end{pmatrix}, \quad (4.97)$$

y sus auto valores son:

$$\lambda_{\pm} = -\frac{a}{4} \pm \frac{a}{2} \left(I + \frac{1}{2} \right) \sqrt{x^2 + 1 + \frac{2xm_F}{\left(I + \frac{1}{2} \right)}} + cm_F, \quad (4.98)$$

siendo $x = \frac{b-c}{a\left(I+\frac{1}{2}\right)}$. Ahora se reemplaza $I = \frac{3}{2}$ y como a es una constante que se puede escribir como $a = \frac{\varepsilon_0}{2}$ donde ε_0 es la contribución a la energía debido al estado hiperfino. Así los auto valores serán:

$$\lambda_{\pm} = -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \sqrt{1 + xm_F + x^2} + cm_F, \quad (4.99)$$

ya que $m_F = -1, 0, 1$ se tiene 6 energías en total, dos para cada valor de m_F , de las cuales corresponden 3 para $F = 1$ y 3 para $F = 2$. Ahora el problema es saber cuáles corresponden a cada valor de F , para esto se hace el tratamiento sin campo magnético, es decir encontrar las energías de H_z con $B = 0$. De la ecuación (4.92) se puede ver que si $B = 0$ el Hamiltoniano será $\hat{H}_z = a\vec{I}\cdot\vec{J} = \frac{a}{2}(F^2 - I^2 - J^2)$, este es diagonal en la base $|F, m_F\rangle$. Entonces si se calcula el valor esperado en esta base se tiene que,

$$\langle F, m_F | \hat{H}_z | F, m_F \rangle = \frac{a}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)], \quad (4.100)$$

debido a que $I = \frac{3}{2}$, $j = \frac{1}{2}$ y $F = 1, 2$ se tienen las siguientes energías para \hat{H}_z

$$\hat{H}_z = \begin{cases} -\frac{5}{4}a & \text{si } F = 1 \\ \frac{3}{4}a & \text{si } F = 2 \end{cases}, \quad (4.101)$$

entonces cuando se considera el campo magnético el valor esperado del Hamiltoniano debería ser el encontrado para campo $B = 0$ más un término adicional que dependa del campo magnético. Para esto se piensa en una matriz diagonal para \hat{H}_z la cual en la diagonal tendrá las energías E_{m_F} de la siguiente manera,

$$\hat{H}_z = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{-1} \end{pmatrix}, \quad (4.102)$$

con auto vectores,

$$|F, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |F, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |F, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.103)$$

donde las E_{m_F} están dadas por la ecuación (4.99) de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} E_{1\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \sqrt{1+x+x^2} + c, \\ E_{0\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \sqrt{1+x^2}, \\ E_{-1\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \sqrt{1-x+x^2} - c, \end{aligned} \quad (4.104)$$

debido a que $x \ll 1$ por ser del orden del magnetón de Bohr ($10^{-24} J.T^{-1}$) se hace una expansión de las raíces a segundo orden en x es decir $\sqrt{1+x} \approx (1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{8}x^2)$ así las energías serán:

$$\begin{aligned} E_{1\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2\right) + c, \\ E_{0\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 + \frac{1}{2}x^2\right), \\ E_{-1\pm} &= -\frac{\varepsilon_0}{8} \pm \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2\right) - c. \end{aligned} \quad (4.105)$$

La representación matricial de los operadores $\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z$ si $F = 1$ es [14]:

$$\hat{F}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.106)$$

Un estado cualquiera puede ser representado como una combinación lineal de los estados de la expresión (4.103), es decir,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= C_1 |F, 1\rangle + C_0 |F, 0\rangle + C_{-1} |F, -1\rangle, \\ \Psi &= \begin{pmatrix} C_1 \\ C_0 \\ C_{-1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.107)$$

donde los $C_i \in \mathbb{C}$ y cumplen la siguiente relación $|C_1|^2 + |C_0|^2 + |C_{-1}|^2 = 1$. Ahora se calcula el valor esperado de la \hat{F}_z y \hat{F}_z^2 en este estado,

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{F}_z | \Psi \rangle &= \hbar [|C_1|^2 - |C_{-1}|^2], \\ \langle \Psi | \hat{F}_z^2 | \Psi \rangle &= \hbar^2 [|C_1|^2 + |C_{-1}|^2].\end{aligned}\quad (4.108)$$

Se procede calculando el valor esperado de la matriz \hat{H}_z tomando las energías E_{1-} , E_{0-} , E_{-1-} ,

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \hat{H}_z | \Psi \rangle &= E_{1-} |C_1|^2 + E_{0-} |C_0|^2 + E_{-1-} |C_{-1}|^2 \\ &= |C_1|^2 \left(-\frac{\varepsilon_0}{8} - \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 \right) + c \right) \\ &\quad + |C_0|^2 \left(-\frac{\varepsilon_0}{8} - \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 + \frac{1}{2}x^2 \right) \right) \\ &\quad + |C_{-1}|^2 \left(-\frac{\varepsilon_0}{8} - \frac{\varepsilon_0}{2} \left(1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 \right) - c \right) \\ &= -\frac{5\varepsilon_0}{8} - \left(\frac{\varepsilon_0 x}{4} - c \right) [|C_1|^2 - |C_{-1}|^2] \\ &\quad - \frac{3\varepsilon_0 x^2}{16} [|C_1|^2 + |C_{-1}|^2] - \frac{\varepsilon_0 x^2}{4} |C_0|^2\end{aligned}$$

dado que $|C_1|^2 + |C_0|^2 |C_{-1}|^2 = 1 - |C_1|^2 - |C_{-1}|^2$ y usando la expresión (4.108), se tiene,

$$\langle \Psi | \hat{H}_z | \Psi \rangle = -\frac{5\varepsilon_0}{8} - \left(\frac{\varepsilon_0 x}{4} - c \right) \frac{\langle \Psi | \hat{F}_z | \Psi \rangle}{\hbar} + \frac{\varepsilon_0 x^2}{16} \frac{\langle \Psi | \hat{F}_z^2 | \Psi \rangle}{\hbar^2} - \frac{\varepsilon_0 x^2}{4}, \quad (4.109)$$

ahora si en la ecuación anterior se hace el campo magnético cero, ($c = 0$ y $x = 0$) se obtiene la energía de $F = 1$. A continuación para llevar el anterior tratamiento a una forma más general se tomará la ecuación (4.98) y se hará el desarrollo de la raíz, pero esta vez tan solo a primer orden. De esta manera las energías estarán dadas por:

$$E_{\pm} = a \left(-\frac{1}{4} \pm \frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \right) \right) + m_F \left(c \pm \frac{b-c}{2 \left(I + \frac{1}{2} \right)} \right), \quad (4.110)$$

el primer término es la energía debido a la estructura hiperfina del sistema, la cual no se tendrá en cuenta debido a que lo único que hace es un corrimiento en la energía. Ahora reemplazando c y b por sus equivalentes, obteniendo así la ecuación para la energía debido a que se consideran los grados de libertad internos.

$$E_{\pm} = \left(-g_I \pm \frac{g_J + g_I}{2 \left(I + \frac{1}{2} \right)} \right) \mu_B B m_F. \quad (4.111)$$

Con estas aproximaciones se puede concluir, que debido a la presencia de un campo magnético el Hamiltoniano será:

$$\hat{H}_z = g_F \mu_B \vec{B} \cdot \vec{F}, \quad (4.112)$$

siendo $g_F = \left(-g_I \pm \frac{g_J + g_I}{2 \left(I + \frac{1}{2} \right)} \right)$. El primer término del Hamiltoniano (3.45) es:

$$\sum_{i,j} \hat{b}_i^\dagger \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle \hat{b}_j,$$

donde \hat{H}_0 está dado por la ecuación (3.28)

$$\hat{H}_0(x_k) = \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + V_{ext}(\hat{x}_k),$$

donde i, j representan, cada uno, un conjunto de números cuánticos de ese estado de una sola partícula. Al introducir el espín se tendrá,

$$\sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \hat{b}_{i,\alpha}^\dagger \langle i\alpha | \hat{H}_0 + \hat{H}_z | j\beta \rangle \hat{b}_{j,\beta}, \quad (4.113)$$

el cual, en términos de los operadores de campo será,

$$\sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}, t) + g_F \mu_B \sum_{\alpha,\beta} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\vec{r}, t) \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}, t), \quad (4.114)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\alpha}^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}^*(\vec{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}^\dagger, \\ \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}, t) &= \sum_k \phi_{k,\alpha}(\vec{r}, t) \hat{b}_{k,\alpha}, \end{aligned} \quad (4.115)$$

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

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t) \right] &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha,\beta}, \\ \left[\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t), \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t) \right] &= 0, \\ \left[\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}, t), \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \right] &= 0. \end{aligned} \quad (4.116)$$

Ahora se trabajará el término de interacción atómica, es decir el segundo término del Hamiltoniano de la ecuación (3.45). Debido a que se están considerando partículas con espín diferente de cero se debe modificar el término de interacción, para ello se consideran dos partículas con espín $F_1 = 1$, $F_2 = 1$. De la teoría de momento angular se tiene que $\mathcal{F} = F_1 + F_2$, entonces se puede estudiar el sistema en cualquiera de las dos bases $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle$ o $|F_1, m_1\rangle \otimes |F_2, m_2\rangle = |F_1, m_1; F_2, m_2\rangle$, puesto que son equivalentes, debido a que $F_1 = F_2 = 1$ se simplificará la notación de esta última base de la siguiente manera $|F_1, m_1; F_2, m_2\rangle = |m_1; m_2\rangle$. Teniendo en cuenta que $\mathcal{F} = 0, 1, 2$ se tendrá los estados $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle = |2, 2\rangle, |2, 1\rangle, |2, 0\rangle, |2, -1\rangle, |2, -2\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$ los cuales están dados en términos de la base tal con los coeficientes de Clebsch Gordan,

$$\begin{aligned} |2, 2\rangle &= |1; 1\rangle, \\ |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle + |0; 1\rangle), \\ |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|1; -1\rangle + 2|0; 0\rangle + |-1; 1\rangle), \\ |2, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\ |2, -2\rangle &= |-1; -1\rangle, \\ |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; 0\rangle - |0; 1\rangle), \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1; -1\rangle - |-1; 1\rangle), \\ |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1; 0\rangle + |0; -1\rangle), \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|1; -1\rangle - |0; 0\rangle + |-1; 1\rangle). \end{aligned} \quad (4.117)$$

Como se puede ver los estados $|1, m_{\mathcal{F}}\rangle$ son anti simétricos por lo cual estos estados serán desechados, porque se está trabajando con bosones. Ahora recordando el término de interacción del Hamiltoniano en segunda cuanización (3.45),

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

donde i, j, k, l representan, cada uno, un conjunto de números cuánticos de ese estado de una sola partícula. Si se introduce el espín el conjunto de números cuánticos i tendrá en cuenta este nuevo número cuántico, pero para hacerlo más claro se escribirá explícitamente el espín. Entonces se tiene que el término de interacción será:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \sum_{i, j, k, l} \hat{b}_{i, \alpha}^\dagger \hat{b}_{j, \beta}^\dagger \langle i \alpha, j \beta | V | k \gamma, l \sigma \rangle \hat{b}_{k, \gamma} \hat{b}_{l, \sigma}, \quad (4.118)$$

en términos de los operadores de campo es:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int dr \int dr' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t) V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}', t), \quad (4.119)$$

usando la aproximación del potencial a bajas energías se tiene:

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} g_{\alpha, \beta, \gamma, \sigma} \int d^3 r \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}, t), \quad (4.120)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{m_{\mathcal{F}}=-\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} \int d^3 r \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}, t) \\ \sum_{\gamma, \sigma=-F}^F \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \gamma; \sigma \rangle \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.121)$$

es decir, se pasa de considerar las dos partículas como individuales a considerarlas como sistema de dos partículas con espín total $\mathcal{F} = 0, 2$. Donde los operadores de creación y aniquilación de pares de partículas con espín total \mathcal{F} y proyección $m_{\mathcal{F}}$ son:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}^\dagger(\vec{r}, t) &= \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}, t), \\ \hat{\Psi}_{\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}}(\vec{r}, t) &= \sum_{\alpha, \beta=-F}^F \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \alpha; \beta \rangle \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.122)$$

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

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \quad (4.123)$$

donde $\hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} = \langle \alpha; \beta | \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} \rangle \langle \mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} | \alpha; \beta \rangle$ es el elemento de matriz del proyector $\hat{P}_{\mathcal{F}}$ en la base $|F_1, m_1; F_2, m_2\rangle$. Entonces si se considera el espín total de los átomos el Hamiltoniano (3.76) se convierte en,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}, t) + g_F \mu_B \sum_{\alpha,\beta} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.124)$$

siendo $\left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta}$ la componente $\nu\beta$ de la matriz $\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F}$ dada por $\langle \nu | \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right] | \beta \rangle$. Ahora se procede a calcular la ecuación de Heisenberg, para esto de nuevo se dividirá el Hamiltoniano (4.124) en tres términos $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3$ y se calcularán los respectivos conmutadores,

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \sum_{\alpha} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{H}_0 \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}, t), \\ \hat{H}_2 &= g_F \mu_B \sum_{\alpha,\beta} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}, t) \\ \hat{H}_3 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\gamma}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.125)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t), \hat{H}_1 \right] + \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t), \hat{H}_2 \right] + \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t), \hat{H}_3 \right]. \quad (4.126)$$

El primer conmutador ya fue calculado y está dado por la ecuación (3.81). A continuación, se calculará el segundo conmutador.

$$\begin{aligned}
 \left[\hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &\quad - g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \\
 &= g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &\quad - g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t)
 \end{aligned}$$

le las relaciones de conmutación (4.116) se tiene que,

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) = \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha, \nu}, \quad (4.127)$$

usando esta relación

$$\begin{aligned}
 &= g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &\quad - g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \int d^3 r' \left(\hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) - \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha, \nu} \right) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &= g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &\quad - g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 &\quad + g_F \mu_B \sum_{\alpha, \beta} \int d^3 r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha, \nu} \left[\vec{B}(\vec{r}', t) \cdot \vec{F} \right]^{\alpha\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}', t) \\
 \left[\hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= g_F \mu_B \sum_{\beta} \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}, t), \quad (4.128)
 \end{aligned}$$

ahora el tercer conmutador,

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t), \hat{H}_3 \right] &= \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}', t) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \int d^3 r' \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\beta^\dagger(\vec{r}', t) \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\beta,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}', t) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

trabajando sobre el segundo término usando la relación (4.127)

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

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

$$\left[\hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t), \hat{H}_3 \right] = \sum_{\mathcal{F}=0,2}^{2F} g_{\mathcal{F}} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \hat{P}_{\mathcal{F}}^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}, t) \quad (4.129)$$

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

$$\begin{aligned} \sum_{\mathcal{F}} \hat{P}_{\mathcal{F}} &= \mathbb{I}_{\mathcal{F}} = \mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2, \\ \vec{F}_1 \cdot \vec{F}_2 &= \sum_{\mathcal{F}} \frac{1}{2} [(+1) - 2F(F+1)] \hat{P}_{\mathcal{F}}, \end{aligned} \quad (4.130)$$

ya que $F = 1$ solo se tienen los siguientes proyectores:

$$\begin{aligned} \hat{P}_0 &= \frac{1}{3} \left(\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 - \vec{F}_1 \cdot \vec{F}_2 \right), \\ \hat{P}_2 &= \frac{1}{3} \left(2\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 + \vec{F}_1 \cdot \vec{F}_2 \right), \end{aligned} \quad (4.131)$$

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

$$\begin{aligned} \hat{P}_0^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= \delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} - \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle, \\ \hat{P}_2^{\alpha,\nu,\gamma,\sigma} &= 2\delta_{\alpha,\gamma} \delta_{\nu,\sigma} + \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle, \end{aligned} \quad (4.132)$$

reemplazando esto en la ecuación (4.129) se obtiene,

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t), \hat{H}_2 \right] &= \sum_{\alpha} \frac{g_0 + 2g_2}{3} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\nu}(\vec{r}, t) \\ &+ \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \frac{g_2 - g_0}{3} \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_{\gamma}(\vec{r}, t) \cdot \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (4.133)$$

usando las expresiones 3.81, (4.128) y (4.133) se tiene que la ecuación de Heisenberg para el operador de campo $\hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t)$ será:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) + g_F \mu_B \sum_{\beta} \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}, t) \\
 &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_{\alpha} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\nu(\vec{r}, t) \\
 &+ \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}_\gamma(\vec{r}, t) \cdot \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}, t).
 \end{aligned} \tag{4.134}$$

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

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \phi_{0,\nu}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\nu}}{\partial t} &= \hat{H}_0 \phi_{0,\nu}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\nu} + g_F \mu_B \sum_{\beta} \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \phi_{0,\beta}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\beta} \\
 &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} N \sum_{\alpha} \phi_{0,\alpha}^*(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \phi_{0,\alpha}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha} \phi_{0,\nu}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\nu} \\
 &+ \frac{g_2 - g_0}{3} N \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \phi_{0,\alpha}^*(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \phi_{0,\gamma}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\gamma} \cdot \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle \phi_{0,\sigma}(\vec{r}, t) \hat{b}_{0,\sigma}.
 \end{aligned} \tag{4.135}$$

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

$$\psi_{0,\alpha}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{n_\alpha}{N}} \phi_{0,\alpha}(\vec{r}, t), \tag{4.136}$$

donde N es el número total de partículas y n_α es el número de partículas en el estado de espín α , con esta definición y teniendo en cuenta, que en el límite termodinámico los operadores $\hat{b}_{0,\alpha} \approx \sqrt{n_\alpha}$, $\hat{b}_{0,\alpha}^\dagger \approx \sqrt{n_\alpha}$ la ecuación (4.135) se reescribe como:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \psi_\nu(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_\nu(\vec{r}, t) + g_F \mu_B \sum_{\beta} \left[\vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \psi_\beta(\vec{r}, t) \\
 &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} N \sum_{\alpha} \psi_\alpha^*(\vec{r}, t) \psi_\alpha(\vec{r}, t) \psi_\nu(\vec{r}, t) \\
 &+ \frac{g_2 - g_0}{3} N \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \langle \alpha | \vec{F} | \gamma \rangle \psi_\alpha^*(\vec{r}, t) \psi_\gamma(\vec{r}, t) \cdot \langle \nu | \vec{F}' | \sigma \rangle \psi_\sigma(\vec{r}, t)
 \end{aligned} \tag{4.137}$$

teniendo en cuenta que N es una constante, esta puede ser absorbida por las g_2 y g_0 definiendo las nuevas como $g_2 = \frac{4\pi\hbar^2 Na_2}{m}$ y $g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 Na_0}{m}$. Usando la notación para los elementos de matriz $\langle\alpha|\vec{F}|\gamma\rangle$, $\langle\nu|\vec{F}'|\sigma\rangle$ y reemplazando \hat{H}_0 dado por (3.28) en la representación de las coordenadas se puede reescribir la ecuación de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
 i\hbar\frac{\partial\psi_\nu(\vec{r},t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\vec{r},t) \right] \psi_\nu(\vec{r},t) \\
 &+ g_F\mu_B \sum_\beta \left[\vec{B}(\vec{r},t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \psi_\beta(\vec{r},t) \\
 &+ \frac{g_0 + 2g_2}{3} \sum_\alpha \psi_\alpha^*(\vec{r},t)\psi_\alpha(\vec{r},t)\psi_\nu(\vec{r},t) \\
 &+ \frac{g_2 - g_0}{3} \sum_{\alpha,\gamma,\sigma} \vec{F}^{\alpha\gamma}\psi_\alpha^*(\vec{r},t)\psi_\gamma(\vec{r},t)\vec{F}'^{\nu\sigma}\psi_\sigma(\vec{r},t)
 \end{aligned} \tag{4.138}$$

Esta última expresión representa un sistema de tres ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, una para cada componente de espín, el cual describe un condensado de Bose-Einstein espinorial en presencia de un campo magnético. Por último, se definen las constantes $c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}$ y $c_2 = \frac{g_2 - g_0}{3}$ haciendo énfasis en que del signo de esta última depende el comportamiento del sistema, si $c_2 < 0$ tendrá un comportamiento ferromagnético y si $c_2 > 0$ un comportamiento polar según la referencia [15].

El potencial de confinamiento que se usará es el de una red óptica el cual se genera a partir de haces de luz láser contra-propagantes, este tipo de potenciales se utilizan para atrapar átomos neutros. El campo eléctrico de un láser está dado por.

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \hat{e}E(\vec{r}) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right), \tag{4.139}$$

siendo \hat{e} un vector unitario de polarización, E la amplitud del campo, y ω su frecuencia. Cuando un átomo neutro es puesto en un campo eléctrico dado por (4.139) se induce en este un momento dipolar que tiene la misma polarización y frecuencia de oscilación del campo.

$$\vec{p}(\vec{r},t) = \hat{e}p(\vec{r}) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right), \tag{4.140}$$

siendo p la amplitud del momento dipolar atómico y está relacionada con la amplitud del campo de la siguiente manera: $p = \alpha E(\vec{r})$ siendo α la polarizabilidad la cual depende de la

frecuencia de ω y es un número complejo. El potencial de interacción del momento dipolar atómico inducido con el campo eléctrico está dado por:

$$U_{dip}(r) = -\frac{1}{2} \langle \vec{p} \cdot \vec{E} \rangle = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} Re(\alpha) I(r), \quad (4.141)$$

donde los corchetes angulares indican un promedio en el tiempo sobre los términos de oscilación rápida, la intensidad del campo viene dada por $I(r) = 2\epsilon_0 c E^2$, ϵ_0 es la permitividad del vacío y el factor de un medio tiene en cuenta que el momento dipolar es inducido. Entonces para poder calcular el potencial se necesita tener la expresión de la polarizabilidad, la cual se la puede calcular con el modelo de Lorentz [16] que considera a un electrón de carga e y masa m_e unido elásticamente al núcleo con una frecuencia propia de oscilación ω_0 la cual corresponde a la frecuencia de transición óptica, considerando que el sistema es amortiguado debido a la radiación del dipolo oscilante.

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_\omega}, \quad (4.142)$$

siendo

$$\Gamma_\omega = \frac{e^2 \omega^2}{6\pi\epsilon_0 m_e c^3}, \quad (4.143)$$

la tasa de amortiguación clásica debido a la radiación de energía (formula de Larmor). Definiendo la tasa de amortiguación en resonancia como $\Gamma = \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \Gamma_\omega$ se puede reescribir la polarizabilidad como:

$$\alpha(\omega) = \frac{6\pi\epsilon_0 c^3}{\omega^2} \frac{\Gamma}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\frac{\omega^3}{\omega_0^2} \Gamma}, \quad (4.144)$$

reemplazando la polarizabilidad (4.144) en la ecuación (4.141) se obtiene el potencial en función de la intensidad,

$$U_{dip}(r) = -\frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(r), \quad (4.145)$$

en el laboratorio se usan $\omega \approx \omega_0$ por lo cual se puede despreciar el segundo término del paréntesis y el potencial será

$$U_{dip}(r) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Gamma}{\omega - \omega_0} I(r). \quad (4.146)$$

De este potencial se puede ver dos casos. El primero si $\omega < \omega_0$ el potencial del dipolo es negativo y por lo tanto los mínimos de este se encuentran en los máximos de intensidad de campo y el caso contrario si $\omega > \omega_0$ el potencial del dipolo es positivo y sus mínimos se encontrarán en los mínimos de intensidad del campo. Y es en estos mínimos de potencial donde son atrapados los átomos.

En el siguiente capítulo, se presentará una aproximación al potencial de red óptica y los métodos numéricos para resolver el sistema de ecuaciones dado por la ecuación 4.138.

Capítulo 5

Métodos numéricos para solucionar la ecuación de Gross-Pitaevskii

La ecuación que se dedujo en el capítulo anterior, como ya se mencionó, es un sistema de 3 ecuaciones diferenciales no lineales, por lo cual no tienen solución analítica. En este capítulo se propondrán métodos numéricos para solucionar dicho sistema de ecuaciones, en particular se tiene el interés de encontrar el estado estacionario del sistema. El primer paso a seguir es adimensionalizar la ecuación (4.138) con el fin de minimizar al máximo el número de parámetros libres.

5.1. Ecuación adimensional

Para adimensionalizar la ecuación se definen unidades de energía: ε , tiempo: τ y longitud l_0 : con estas definiciones se pueden definir nuevas variables $\tilde{t} = \frac{t}{\tau}$, $\tilde{\vec{r}} = \frac{\vec{r}}{l_0}$ y $\tilde{\psi}_\alpha(\tilde{\vec{r}}, \tilde{t}) = l_0 \psi_\alpha(\vec{r}, t)$, las cuales son adimensionales, para la posición tiempo y función de onda respectivamente esta última es definida de esta manera con el fin que se cumpla la condición de normalización. Ahora teniendo en cuenta estas definiciones se puede calcular como transforman las derivadas,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} &= \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{1}{l_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}.\end{aligned}\tag{5.147}$$

Ahora reemplazando estas definiciones en la ecuación (4.138) se obtiene,

$$\begin{aligned}
 i\frac{\hbar}{\tau}\frac{\partial\tilde{\psi}_\nu(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})}{\partial\tilde{t}} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}l_0^{-2}\tilde{\nabla}^2 + V_{ext}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\right]\tilde{\psi}_\nu(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}) \\
 &+ g_F\mu_B\sum_\beta\left[\tilde{\vec{B}}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\cdot\tilde{\vec{F}}\right]^{\nu\beta}\tilde{\psi}_\beta(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}) \\
 &+ \frac{g_0+2g_2}{3}l_0^{-2}\sum_\alpha\tilde{\psi}_\alpha^*(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\tilde{\psi}_\alpha(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\tilde{\psi}_\nu(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}) \\
 &+ \frac{g_2-g_0}{3}l_0^{-2}\sum_{\alpha,\gamma,\sigma}\tilde{F}^{\alpha\gamma}\tilde{\psi}_\alpha^*(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\tilde{\psi}_\gamma(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\cdot\tilde{F}^{\nu\sigma}\tilde{\psi}_\sigma(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}).
 \end{aligned} \tag{5.148}$$

Debido a que la ecuación tiene unidades de energía se divide la misma entre ε y se definen los siguientes parámetros con el fin de simplificar al máximo la anterior ecuación.

$$\begin{aligned}
 \gamma_0 &= \frac{\hbar}{\varepsilon\tau} \\
 \gamma_1 &= \frac{\hbar^2}{\varepsilon l_0^2 m} \\
 \mathbf{v}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}) &= \frac{V_{ext}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})}{\varepsilon} \\
 \mathbf{B}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t}) &= \frac{g_F\mu_B\left|\tilde{\vec{B}}(\tilde{\vec{r}},\tilde{t})\right|}{\varepsilon} \\
 \mathbf{g}_i &= \frac{g_i}{\varepsilon l_0^3} = \frac{4\pi\hbar^2 N a_i}{\varepsilon l_0^2 m}; \quad i = 0, 2,
 \end{aligned} \tag{5.149}$$

con estos parámetros la ecuación (4.138) adimensionalizada será:

$$\begin{aligned}
 i\gamma_0\frac{\partial\psi_\nu(\vec{r},t)}{\partial t} &= \left[-\frac{1}{2}\gamma_1\nabla^2 + \mathbf{v}(\vec{r},t)\right]\psi_\nu(\vec{r},t) \\
 &+ \mathbf{B}(\vec{r},t)\sum_\beta\left[\hat{\mathbf{b}}(\vec{r},t)\cdot\vec{F}\right]^{\nu\beta}\psi_\beta(\vec{r},t) \\
 &+ \frac{\mathbf{g}_0+2\mathbf{g}_2}{3}\sum_\alpha\psi_\alpha^*(\vec{r},t)\psi_\alpha(\vec{r},t)\psi_\nu(\vec{r},t) \\
 &+ \frac{\mathbf{g}_2-\mathbf{g}_0}{3}\sum_{\alpha,\gamma,\sigma}\vec{F}^{\alpha\gamma}\psi_\alpha^*(\vec{r},t)\psi_\gamma(\vec{r},t)\cdot\vec{F}^{\nu\sigma}\psi_\sigma(\vec{r},t),
 \end{aligned} \tag{5.150}$$

siendo $\hat{\mathbf{b}}(\vec{r},t)$ un vector unitario que apunta en la dirección del campo magnético y se ha omitido el colocar las tildes, ya que se sobreentiende que de ahora en adelante se trabajará

con unidades dimensionales. Además, las constantes dimensionales correspondientes a c_0 y c_2 serán $c_0 = \frac{g_0+2g_2}{3}$ y $c_2 = \frac{g_2-g_0}{3}$. Como se ha dicho, esta ecuación representa un sistema de 3 ecuaciones diferenciales una para cada valor de ν , a continuación se trabajarán los dos últimos términos para poner explícitamente estas tres ecuaciones. Desarrollando la sumatoria del tercer término se tiene,

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\vec{r}, t) \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) \psi_{\nu}(\vec{r}, t) = (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_{-1}|^2) (\psi_1 \delta_{\nu,1} + \psi_0 \delta_{\nu,0} + \psi_{-1} \delta_{\nu,-1}), \quad (5.151)$$

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

$$\hat{F}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{F}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.152)$$

no llevan \hbar por el hecho que se está trabajando sin unidades. Desarrollando este último término se obtiene,

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \gamma, \sigma} \vec{F}^{\alpha\gamma} \psi_{\alpha}^*(\vec{r}, t) \psi_{\gamma}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F}^{\nu\sigma} \psi_{\sigma}(\vec{r}, t) = & \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^* \psi_0 + \psi_0^* \psi_1 + \psi_0^* \psi_{-1} + \psi_{-1}^* \psi_0) \hat{i} \right. \\ & + \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_0^* \psi_1 + \psi_{-1}^* \psi_0 - \psi_1^* \psi_0 - \psi_0^* \psi_{-1}) \hat{j} \\ & \left. + (|\psi_1|^2 - |\psi_{-1}|^2) \hat{k} \right) \cdot \\ & \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \delta_{\nu,0} + \psi_0 \delta_{\nu,1} + \psi_0 \delta_{\nu,-1} + \psi_{-1} \delta_{\nu,0}) \hat{i} \right. \\ & + \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_1 \delta_{\nu,0} + \psi_{-1} \delta_{\nu,0} - \psi_0 \delta_{\nu,1} - \psi_0 \delta_{\nu,-1}) \hat{j} \\ & \left. + (\psi_1 \delta_{\nu,1} - \psi_{-1} \delta_{\nu,-1}) \hat{k} \right), \end{aligned} \quad (5.153)$$

reemplazando 5.151 y 5.153 en 5.150 se obtiene después de simplificar las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 i\gamma_0 \frac{\partial \psi_\nu(\vec{r}, t)}{\partial t} = & \left[-\frac{1}{2}\gamma_1 \nabla^2 + v(\vec{r}, t) \right] \psi_\nu(\vec{r}, t) + B(\vec{r}, t) \sum_{\beta} \left[\hat{b}(\vec{r}, t) \cdot \vec{F} \right]^{\nu\beta} \psi_\beta(\vec{r}, t) \\
 & + \delta_{\nu,1} \left\{ \psi_1 \left[(c_0 + c_2) (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2) + (c_0 - c_2) |\psi_{-1}|^2 \right] + c_2 \psi_{-1}^* \psi_0 \psi_0 \right\} \\
 & + \delta_{\nu,0} \left\{ \psi_1 \left[(c_0 + c_2) (|\psi_1|^2 + |\psi_{-1}|^2) + c_0 |\psi_0|^2 \right] + 2c_2 \psi_0^* \psi_1 \psi_{-1} \right\} \\
 & + \delta_{\nu,-1} \left\{ \psi_{-1} \left[(c_0 + c_2) (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2) + (c_0 - c_2) |\psi_1|^2 \right] + c_2 \psi_1^* \psi_0 \psi_0 \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.154}$$

Debido a que el potencial externo en el que se trabajará son redes ópticas se usarán las unidades naturales de estos potenciales [17] para adimensionalizar la ecuación en cuestión,

$$\varepsilon = E_r, \quad l_0 = \frac{\lambda}{2}, \quad \tau = \frac{\hbar}{E_r} \tag{5.155}$$

siendo E_r la energía de recoil dada por $E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ con m la masa de la partícula y $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ donde λ es la misma con la que se define l_0 y es la longitud de onda del láser que se utiliza para generar la trampa óptica. La equivalencia de τ es con el fin de que $\gamma_0 = 1$, es arbitrario, debido a que el objetivo de este trabajo es observar lo estados estacionarios. A continuación, se procederá a calcular los valores de los parámetros que se van a usar en las respectivas unidades dadas por las ecuaciones (5.157), para lo cual se utilizaran valores que se reportan de experimentos [18], donde se reporta que el número de átomos en la red es $N = 2,5 \times 10^4$ usando una longitud de onda $\lambda = 1064\text{nm}$, por otro lado el valor de la masa m , razón giromagnética g_F y longitudes de dispersión a_i se obtienen de la referencia [19]. A continuación se presentan los valores de los parámetros necesarios para hacer los cálculos de

las constantes.

$$\begin{aligned}
 N &= 2,5 \times 10^4, \\
 \lambda &= 1064nm, \\
 m &= 86,909 \quad 180 \quad 520(15)u, \\
 g_F &= -\frac{1}{2}, \\
 a_0 &= 101,8a_B, \\
 a_2 &= 100,4a_B,
 \end{aligned}
 \tag{5.156}$$

Donde $u = 1,660538921(73) \times 10^{-24}g$ y $a_B = 5,2917721092(17) \times 10^{-9}cm$. Entonces las unidades de energía (ε) y longitud (l_0) serán:

$$E_r = 1,343639 \times 10^{-30}J, \quad l_0 = 532nm, \quad \tau = 7,848611 \times 10^{-5}s \tag{5.157}$$

con esto las constantes de la ecuación 5.154 se presentan en la siguiente tabla:

Constante	γ_0	γ_1	g_0	g_2	c_0	c_2
Valor	1	0.202642	644,640225	635,77484	638,72997	-2,95513

Cuadro 5.1: Constantes de la ecuación adimensional.

5.2. Potencial externo y Campo magnético

Ahora es necesario aclarar cuál será potencial de red óptica y el campo magnético que se van a usar, al igual que sus magnitudes. Este trabajo se enfocará en potenciales de red óptica de dos dimensiones los cuales se pueden aproximar de la forma:[18]:

$$V(x, y) = V_0 (\text{sen}^2(kx) + \text{sen}^2(ky)) , \tag{5.158}$$

siendo V_0 la profundidad del potencial y $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ donde λ es la longitud de onda del láser con el que se genera la red, en particular se tomara un $V_0 = 10E_r$ y una $\lambda = 1064\text{nm}$ por lo cual el potencial adimensional será:

$$v(x, y) = 10 (\text{sen}^2(\pi x) + \text{sen}^2(\pi y)). \quad (5.159)$$

Cabe resaltar que en el laboratorio se tiene como potencial externo el potencial de la red óptica más el potencial de la trampa armónica, por lo cual se debería considerar que el potencial externo es una suma de estos, pero al momento de hacer el análisis numérico solo se tendrá en cuenta la red óptica y se pondrá la condición de que las funciones de onda se hagan cero en la frontera, lo cual es “equivalente” a tener la trampa armónica y los resultados respecto a la formación de dominios magnéticos y magnetización de la muestra no cambian. Los campos magnéticos que se usan usualmente para estos experimentos según la referencia [19] son aproximadamente del orden de Gauss el cual equivale a 10^{-4} Teslas, con esto y teniendo en cuenta el valor del magnetón de Bohr $\mu_B = 9,27400965 \times 10^{-24} \text{JT}^{-1}$ se tiene que:

$$B(\vec{r}, \tilde{t}) = 345,1079375 \quad (5.160)$$

5.3. Evolución en tiempo imaginario

Una propiedad importante del operador Hamiltoniano es que es hermítico, debido a esto sus auto valores son reales y si se tiene un potencial apropiado estos serán positivos. La ecuación a resolver es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (5.161)$$

si se tiene una condición inicial para la función de onda $\psi(\vec{r}, 0) = \psi_0(\vec{r})$. La solución a esta ecuación está dada por el operador de evolución temporal $e^{-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}}$ de la siguiente forma,

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}} \psi_0(\vec{r}). \quad (5.162)$$

Como las auto funciones del Hamiltoniano ($\phi_k(\vec{r})$) conforman una base, se puede expresar la condición inicial como una combinación lineal de estas funciones de la siguiente manera,

$\psi_0(\vec{r}) = \sum_k C_k \phi_k(\vec{r})$, si reemplazamos esto en la ecuación (5.162) la solución se la puede escribir como:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}} C_k \phi_k(\vec{r}), \quad (5.163)$$

donde E_k es la energía asociada a la auto función $\phi_k(\vec{r})$, ahora si se hace una rotación de Wick [20] en la coordenada temporal es decir hacer $t = -i\tau$ con $\tau \in \mathbb{R}$ se obtendrá

$$\psi(\vec{r}, -i\tau) = \sum_k e^{-\frac{E_k \tau}{\hbar}} C_k \phi_k(\vec{r}). \quad (5.164)$$

De esta última ecuación se puede observar que para un τ lo suficientemente largo se puede aproximar la solución como,

$$\psi(\vec{r}, -i\tau) \approx e^{-\frac{E_0 \tau}{\hbar}} C_0 \phi_0(\vec{r}), \quad (5.165)$$

siendo E_0 la menor energía del sistema, a esta evolución en τ se le llama evolución en tiempo imaginario [21].

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

$$-\frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t), \quad (5.166)$$

Por lo cual la única forma de aplicar este método no es solo usando el operador de evolución temporal, sino que también se lo puede usar en conjunto con métodos para solucionar ecuaciones diferenciales. También hay que tener en cuenta que este método disminuye la norma de la función de onda por lo cual es necesario renormalizar la función de onda a cada paso.

Hasta ahora se ha propuesto como encontrar el estado estacionario de un sistema mas no el método para solucionar la ecuación diferencial. A continuación se presenta el método Runge-Kutta de cuarto orden, el cual usará para resolver el sistema de ecuaciones dado por la ecuación (5.154) después de hacer $t = -i\tau$.

5.4. Runge-Kutta de cuarto orden

Una deducción del método se puede encontrar en la referencia [22], este es un método iterativo para resolver ecuaciones diferenciales de la forma [23],

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x, t), \quad (5.167)$$

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

$$\begin{cases} \frac{\partial x_1}{\partial t} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \\ \frac{\partial x_2}{\partial t} = f_2(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \\ \vdots \\ \frac{\partial x_N}{\partial t} = f_N(x_1, x_2, \dots, x_N, t) \end{cases} \quad (5.168)$$

dadas las respectivas condiciones iniciales $x_i(t = 0) = a_i$ con $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Para este trabajo se necesita resolver el sistema de ecuaciones diferenciales dado por la ecuación (5.154) haciendo $t = -i\tau$. Es decir, el sistema de 3 ecuaciones que se quiere resolver es de la forma,

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = f(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t) \\ \frac{\partial \psi_0}{\partial t} = g(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t) \\ \frac{\partial \psi_{-1}}{\partial t} = h(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t) \end{cases} \quad (5.169)$$

dadas las condiciones iniciales $\psi_1(\vec{r}, t)$, $\psi_0(\vec{r}, t)$ y $\psi_{-1}(\vec{r}, t)$ las funciones solución después de un tiempo Δt^1 están dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_1(\vec{r}, t + \Delta t) &= \psi_1(\vec{r}, t) + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\ \psi_0(\vec{r}, t + \Delta t) &= \psi_0(\vec{r}, t) + \frac{\Delta t}{6} (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4), \\ \psi_{-1}(\vec{r}, t + \Delta t) &= \psi_{-1}(\vec{r}, t) + \frac{\Delta t}{6} (m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4), \end{aligned} \quad (5.170)$$

¹ Δt es conocido como tamaño de paso

donde las constantes k_i están dadas por:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(\psi_1(\vec{r}, t), \psi_0(\vec{r}, t), \psi_{-1}(\vec{r}, t), t), \\
 k_2 &= f\left(\psi_1(\vec{r}, t) + \frac{k_1 \Delta t}{2}, \psi_0(\vec{r}, t) + \frac{l_1 \Delta t}{2}, \psi_{-1}(\vec{r}, t) + \frac{m_1 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\
 k_3 &= f\left(\psi_1(\vec{r}, t) + \frac{k_2 \Delta t}{2}, \psi_0(\vec{r}, t) + \frac{l_2 \Delta t}{2}, \psi_{-1}(\vec{r}, t) + \frac{m_2 \Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right), \\
 k_4 &= f(\psi_1(\vec{r}, t) + k_3 \Delta t, \psi_0(\vec{r}, t) + l_3 \Delta t, \psi_{-1}(\vec{r}, t) + m_3 \Delta t, t + \Delta t),
 \end{aligned} \tag{5.171}$$

de manera similar para las constantes l_i y m_i con las funciones $g(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t)$ y $h(\psi_1, \psi_0, \psi_{-1}, t)$ respectivamente.

Capítulo 6

Resultados

En este capítulo se presentan los resultados de la investigación en torno al estudio de la formación de dominios magnéticos en condensados de Bose espinoriales. En particular, los estados estacionarios que son solución de las ecuaciones acopladas para los espinores (ecuaciones (4.137)) tanto en ausencia de campo magnético, como en presencia del mismo. Como se describe en el capítulo anterior, dichas ecuaciones se resolvieron usando los métodos descritos en el capítulo 5. A continuación, se presentarán los protocolos propuestos para la formación de dichos dominios, los resultados obtenidos y su respectivo análisis. Para todos los cálculos se considerarán átomos de ^{87}Rb confinados en una red óptica bidimensional de tamaño $\Omega = 10 \times 10$ sitios. Además, las funciones de onda iniciales son Gaussianas con ruido.

6.1. Condensado en ausencia de campo magnético

Se proponen diferentes condiciones iniciales de las funciones de onda de cada componente de espín, con el fin observar si al llegar al estado estacionario¹ hay formación de dominios magnéticos o si hay magnetización. A continuación, en la figura 6.1 se muestra como varia la energía a medida que se evoluciona en tiempo imaginario y como varia cuando se llega al estado estacionario.

Protocolo 1

Las condiciones iniciales son funciones de onda centradas en el origen para las tres componentes de espín como se muestra en la figura 6.2. Después de hacer la evolución en tiempo

¹Se considera que el sistema llega al estado estacionario cuando el cambio de la energía es menor a 10^{-5}

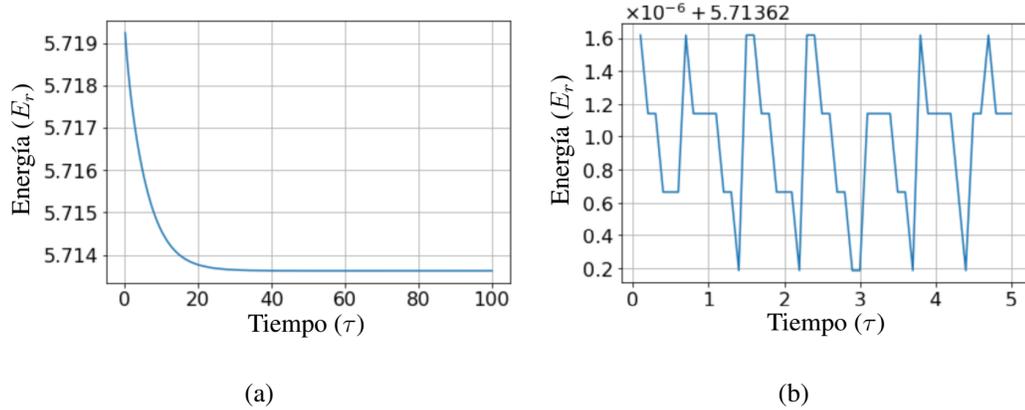


Figura 6.1: (a) Gráfica de la energía en evolución de tiempo imaginario. (b) Gráfica de la energía en tiempo real después de llegar al estado estacionario

imaginario se llega al estado estacionario indicado en la figura 6.3 en donde se observa igual probabilidad de población en cada uno de los estados hiperfinos y al calcular la magnetización del sistema se obtiene que esta es cero.

Protocolo 2

Ahora las condiciones iniciales serán: las componentes ψ_1 y ψ_{-1} centradas en $(2.5,0)$ y $(-2.5,0)$ respectivamente como se muestra en la figura 6.4. Y la componente ψ_0 centrada en $(-2.5,0)$, $(0,0)$ y $(2.5,0)$ como se muestra en la figura 6.5. En el estado estacionario se obtienen resultados iguales a los anteriores en el caso en el que la componente ψ_0 se centre en $(-2.5,0)$ o en $(2.5,0)$ mientras que cuando se centra en $(0,0)$ se observa una mayor probabilidad de que se ocupe el estado hiperfino 0 e igual probabilidad de que se ocupe el ψ_1 o ψ_{-1} (figura 6.6).

6.2. Condensado en presencia de campo magnético

Para cada protocolo se usarán las mismas condiciones iniciales para las funciones de onda las cuales serán gaussianas con ruido centradas en el origen iguales a las usadas en el protocolo 1 (figura 6.2) y se usarán diferentes campos magnéticos con el fin de observar la

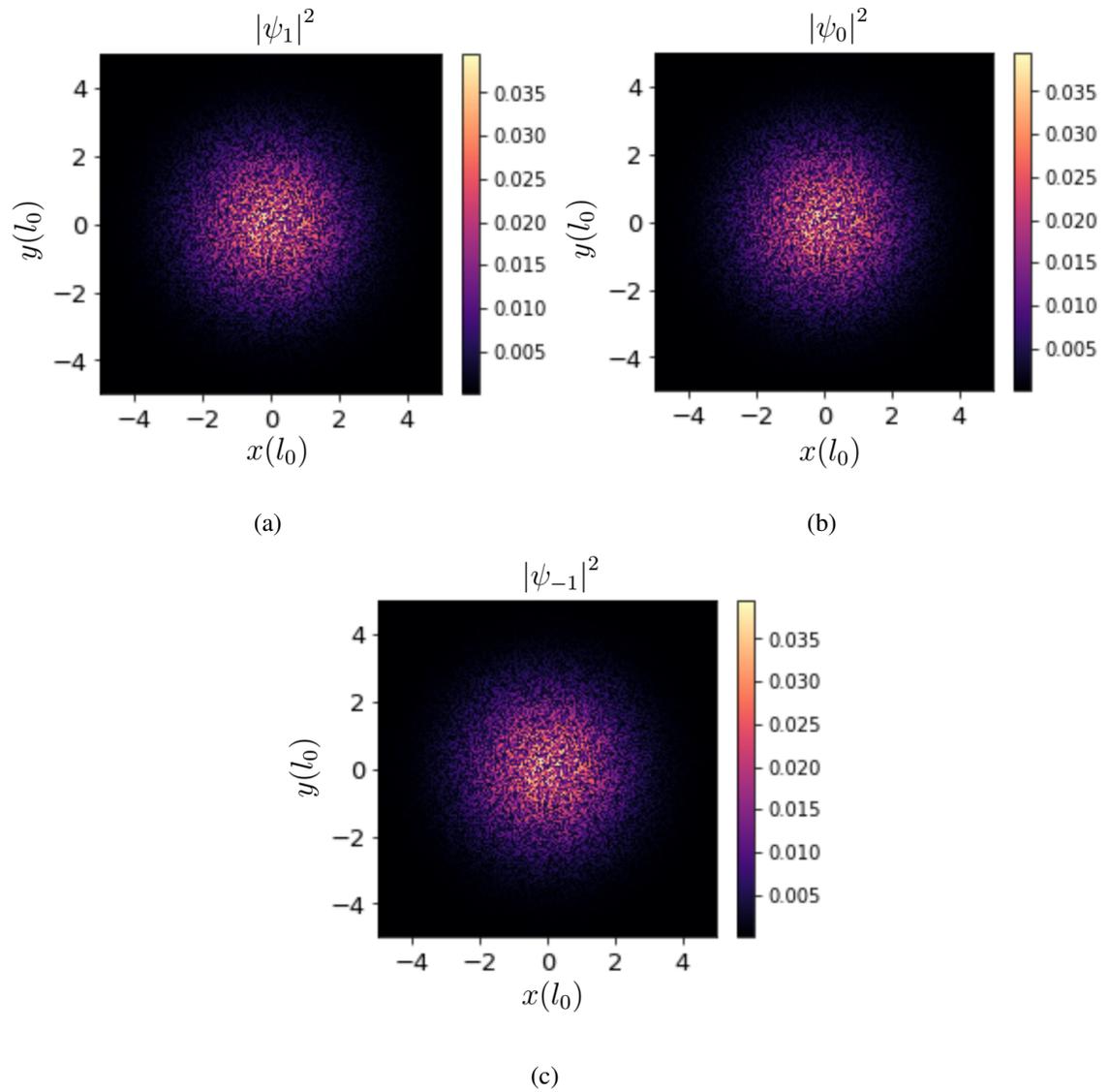


Figura 6.2: Se muestra las respectivas gráficas de la norma al cuadrado de la función de onda inicial para cada estado hiperfino.

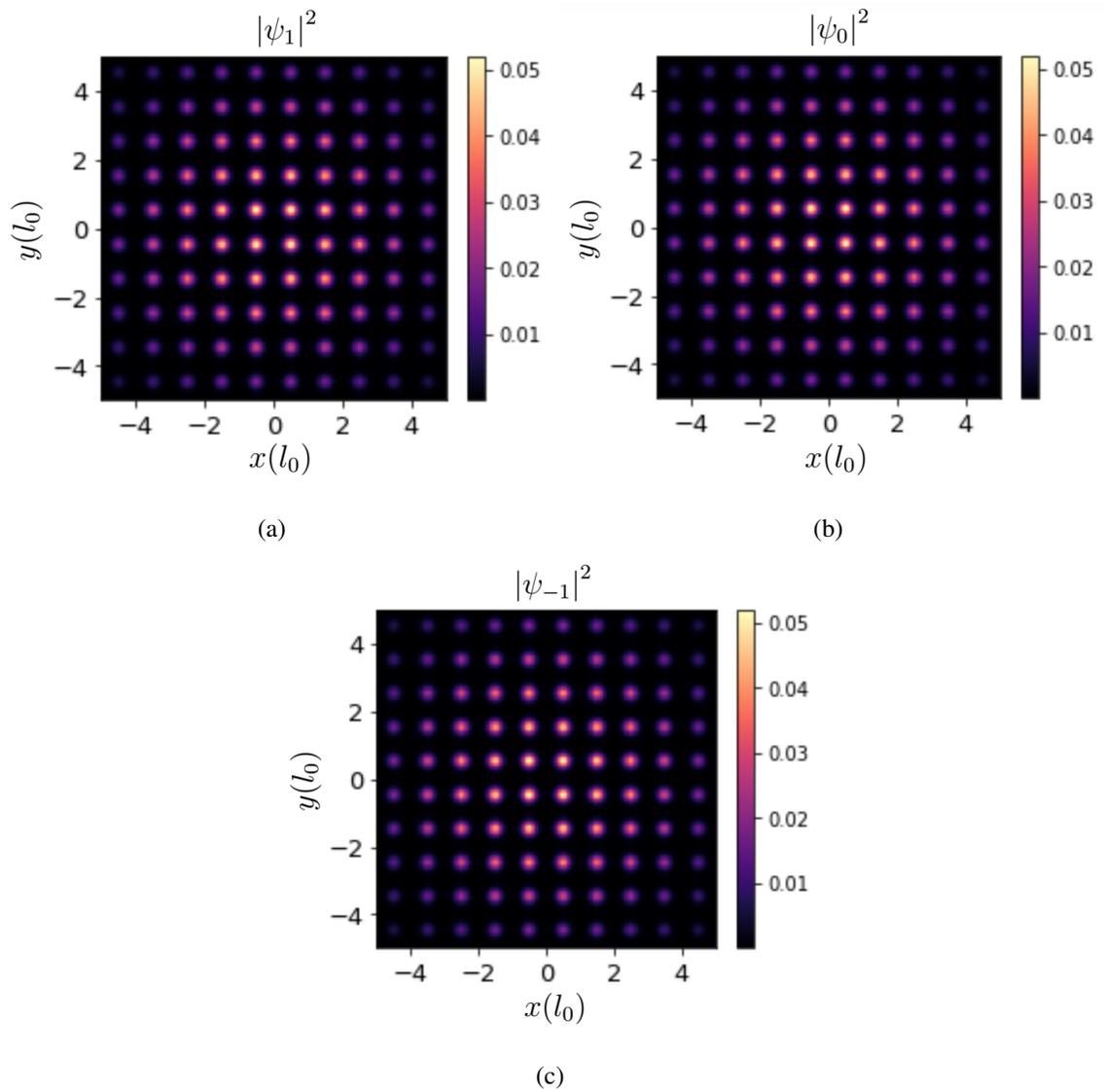


Figura 6.3: Se muestra las respectivas gráficas de la norma al cuadrado de la función de onda en el estado estacionario de cada componente de espín.

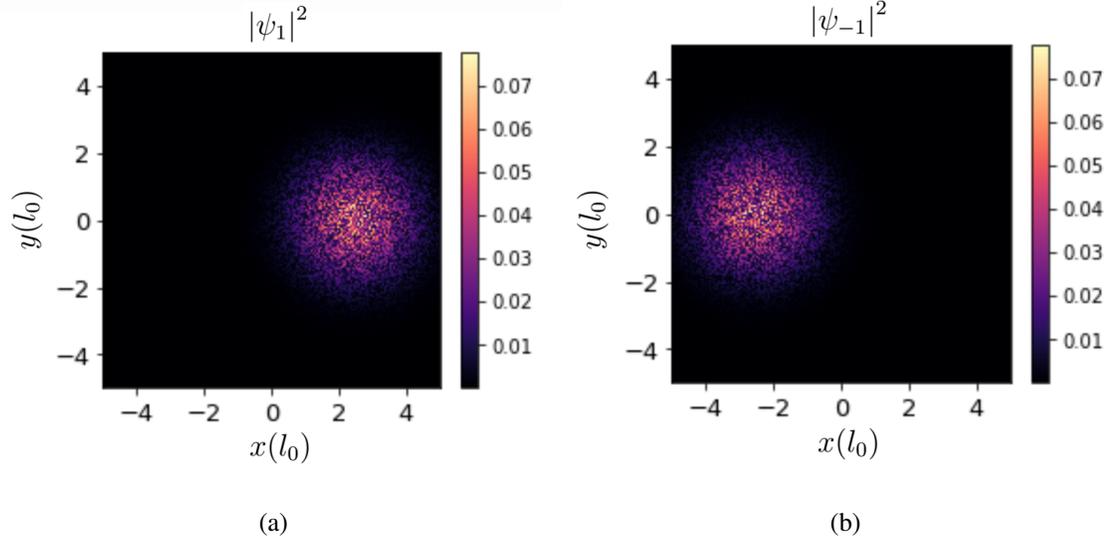


Figura 6.4: (a) función de onda inicial para la componente ψ_1 centrada en $(2.5,0)$. (b) función de onda inicial para la componente ψ_{-1} centrada en $(-2.5,0)$.

formación de dominios magnéticos.

Protocolo 1

Se propone un campo constante de 0.1 gauss a lo largo del eje z , haciendo dos simulaciones diferentes, una en dirección positiva y la otra en dirección negativa. Los resultados para el campo en dirección $-z$ se muestran en las figuras 6.7 (a), 6.7(b) y para dirección del campo en z las figuras 6.7 (c), 6.7(d). Como se puede observar el sistema se puebla totalmente en la componente de espín paralela al campo, mientras que las otras dos se anulan.

Protocolo 2

Con los resultados del experimento anterior se proponen los siguientes campos,

$$\vec{B}(x, y) = \begin{cases} 0,1\hat{k} & \text{si } x > 0 \\ -0,1\hat{k} & \text{si } x < 0 \end{cases}, \quad (6.172)$$

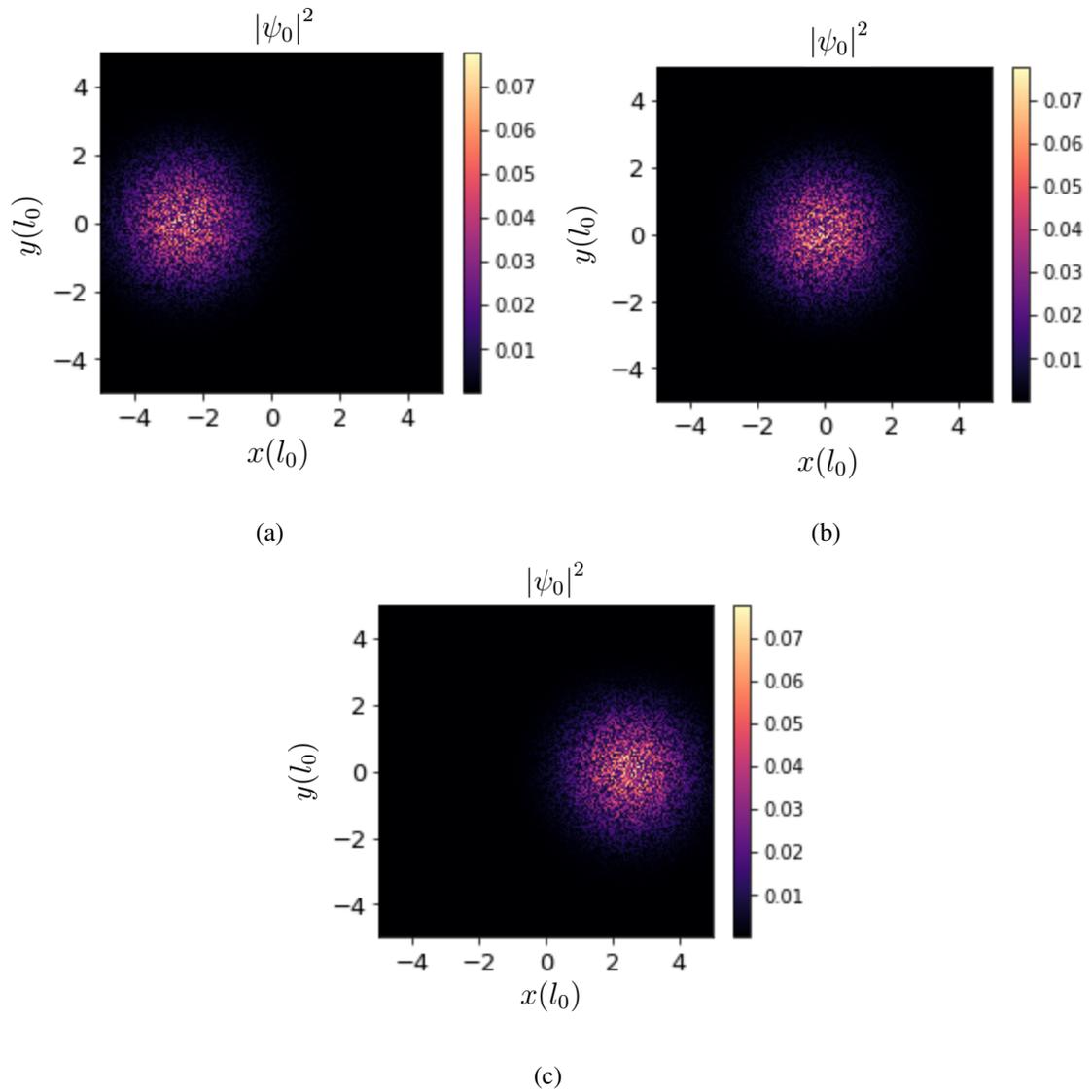


Figura 6.5: (a), (b), (c), funciones de onda iniciales para la componente ψ_0 centrada en $(-2.5, 0)$, $(0, 0)$ y $(2.5, 0)$ respectivamente.

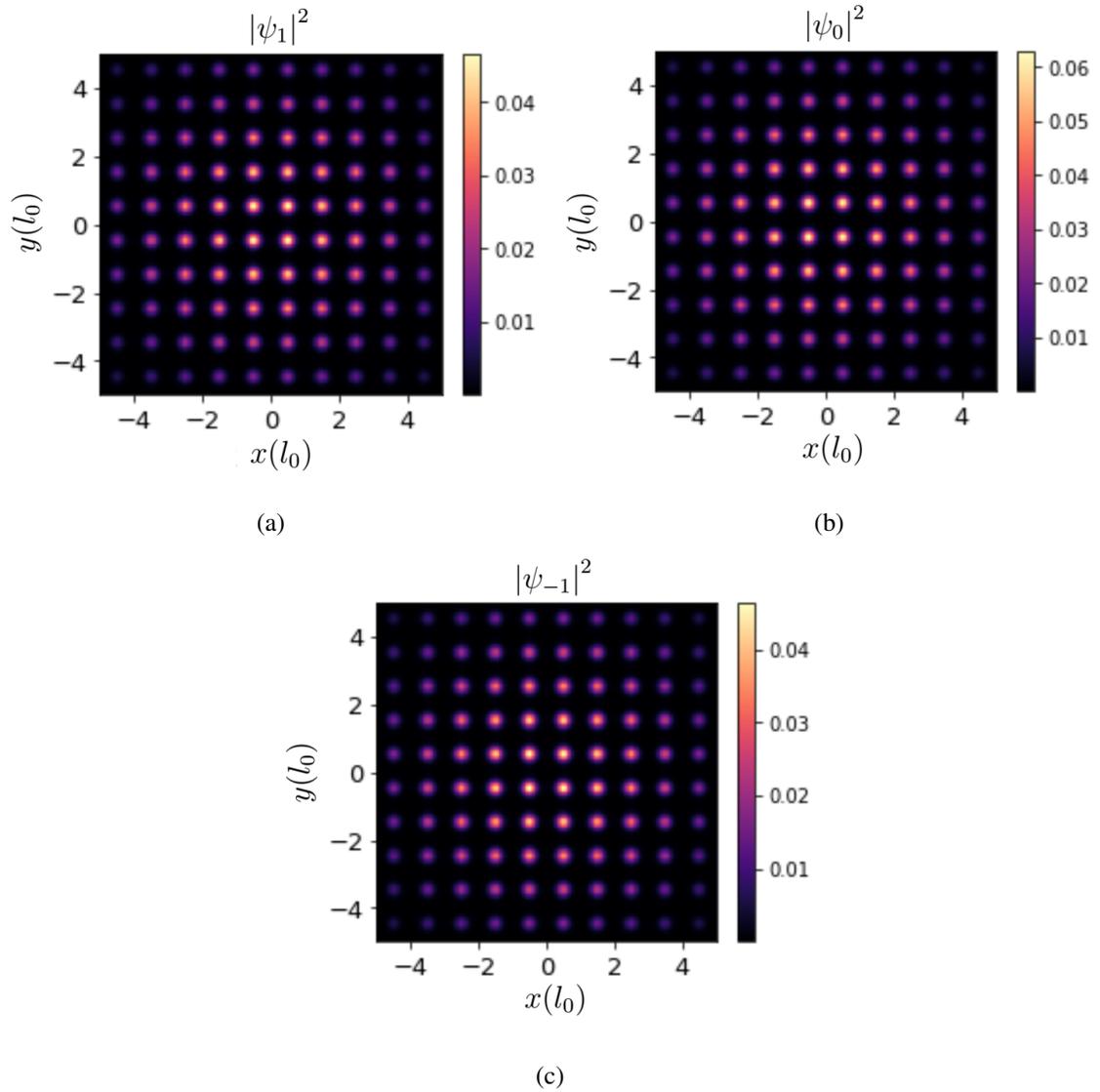


Figura 6.6: (a), (b), (c), estado estacionario para las componentes ψ_{-1} , ψ_0 , ψ_1 , con funciones de onda iniciales centradas en $(-2.5,0)$, $(0,0)$ y $(2.5,0)$ respectivamente.

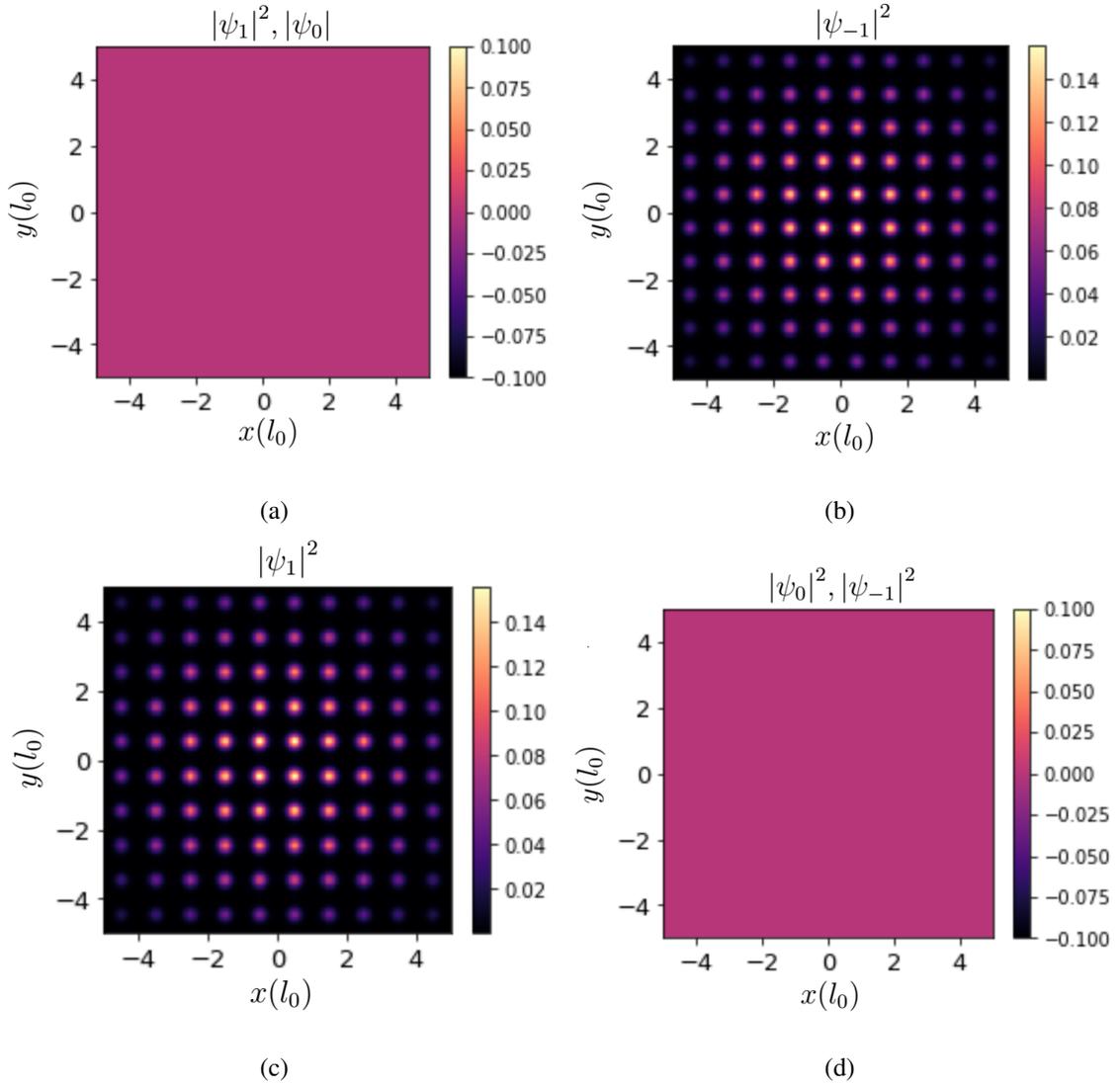


Figura 6.7: Estado estacionario para campo magnético de 0.1 Gauss. (a) y (b) en dirección $-z$. (c) y (d) en dirección z

$$\vec{B}(x, y) = \begin{cases} 0,1\hat{k} & \text{si } xy > 0 \\ -0,1\hat{k} & \text{si } xy < 0 \end{cases}, \quad (6.173)$$

$$\vec{B}(x, y) = \text{sen} \left(\frac{\pi}{5}x \right) \hat{k}, \quad (6.174)$$

$$\vec{B}(x, y) = \frac{1}{5}x\hat{k}, \quad (6.175)$$

una vez obtenido el estado estacionario (figura 6.8 y 6.9) se apaga el campo magnético es decir hacer $\vec{B}(x, y) = 0$ y se deja evolucionar el sistema en tiempo real. Esto con el fin de observar si los dominios creados se mantienen. Lo que se observó al hacer dicha evolución es que los dominios magnéticos empiezan a “oscilar”.

6.3. Análisis

En las simulaciones con campo magnético cero, independientemente de las condiciones iniciales, no se logra observar la formación de dominios magnéticos, pero sí, dependiendo de estas se puede tener una mayor población en una componente de espín, esto es para las condiciones iniciales centradas en $(-2.5,0)$, $(0,0)$ y $(2.5,0)$ y la componente que tiene mayor población es la componente que se centra en $(0,0)$.

Por otra parte, en las simulaciones con campo magnético se logran hacer dominios magnéticos con la peculiaridad que la distribución espacial de estos depende de la intensidad, pues se observa que se puebla los sitios donde el campo es más intenso. Por último cuando se apaga el campo y se ve la dinámica de los dominios formados en todos los casos se observa que estos dominios empiezan a oscilar, es decir las poblaciones de espín que apuntan en dirección z y en dirección \bar{z} empiezan a intercambiar posición.

6.4. Conclusiones

En este trabajo se estudió la formación de dominios magnéticos en un gas de Bose en tres estados hiperfinos, confinado en una red óptica en dos dimensiones. Para realizar dicho propósito primero se presentaron los fundamentos teóricos relacionados con la descripción

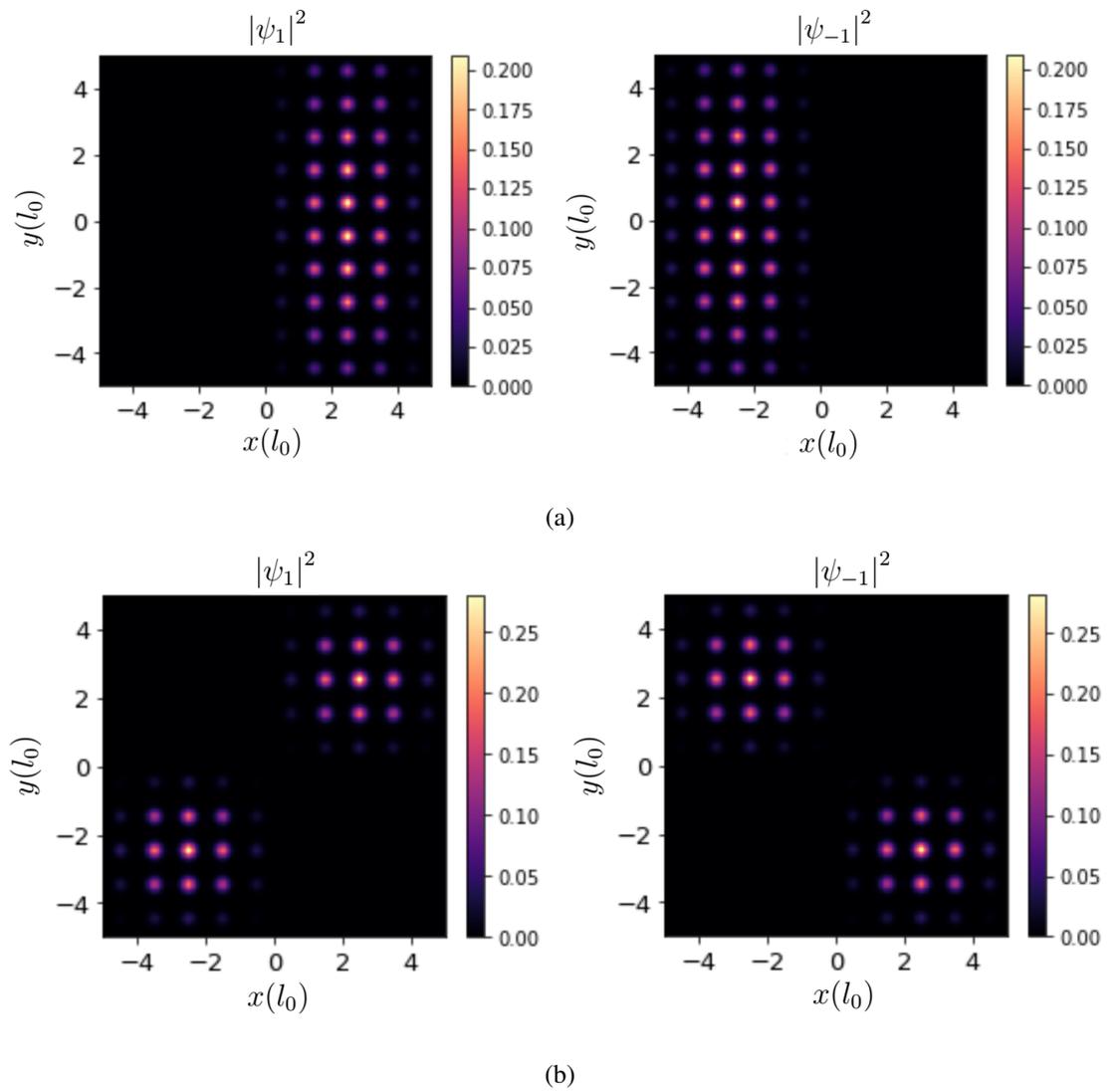
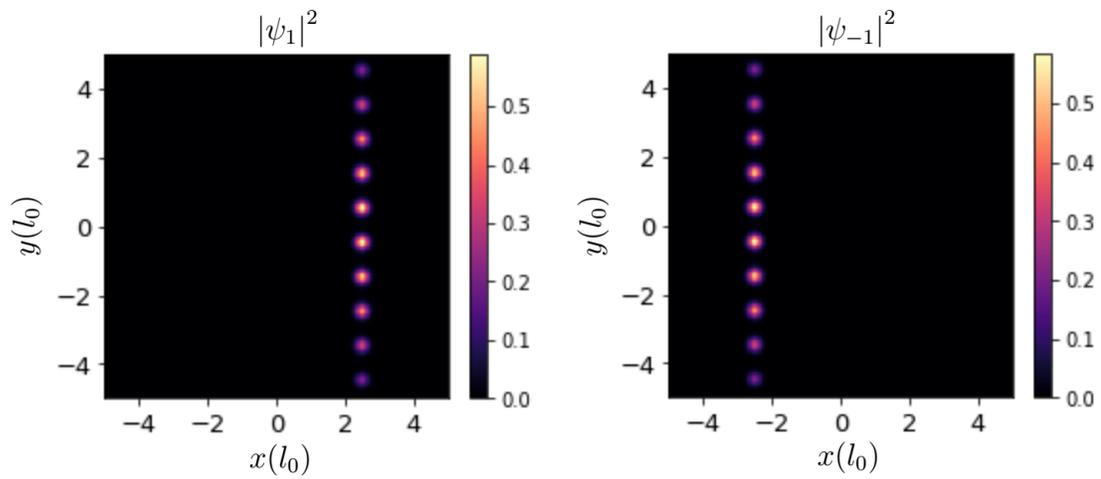
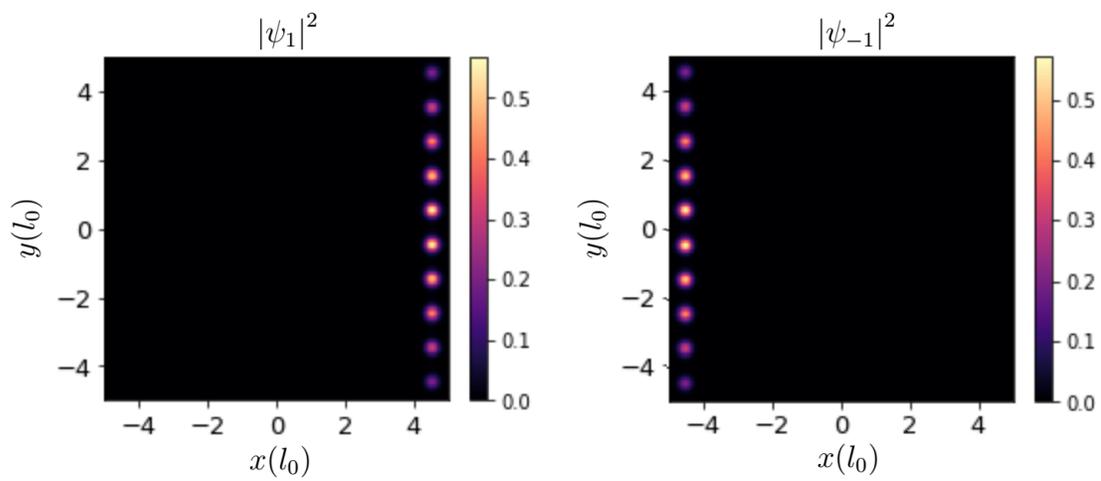


Figura 6.8: (a) y (b) estados estacionarios para los campos magnéticos dados por la ecuación 6.172 y 6.173 respectivamente



(a)



(b)

Figura 6.9: (a) y (b) estados estacionarios para los campos magnéticos dados por la ecuación 6.174 y 6.175 respectivamente

de un condensado de Bose desde el punto de vista ideal, y posteriormente se consideró el papel de las interacciones y el confinamiento por un potencial externo. La consideración de las interacciones entre las partículas y los grados de libertad internos (estructura hiperfina de los átomos) nos permitieron obtener un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales que describen un condensado espinorial a temperatura cero en presencia de un campo magnético (ecuación (4.138)). Estas ecuaciones son la generalización de la conocida ecuación de Gross-Pitaevskii para el caso de una sola componente. Además de estudiar los estados estacionarios también se analizó la dinámica de la formación de dominios magnéticos en condensados de Bose. Se escogió uno de los sistemas más ampliamente estudiados en forma experimental; un condensado formado por átomos de ^{87}Rb confinados en una red óptica bidimensional. Debido a que este sistema de ecuaciones diferenciales no tiene solución analítica por el hecho de ser ecuaciones no lineales, su solución se hizo mediante el uso de métodos numéricos evolución en tiempo imaginario y Runge Kutta de cuarto orden (los cuales se encuentran en el capítulo 5 de este documento), con los cuales se encuentra el estado estacionario del sistema. Se hicieron diferentes simulaciones tanto en ausencia de campo magnético como en presencia de campo magnético con lo cual se logró formar dominios magnéticos. Una vez formados se estudió la dinámica de estos dominios evolucionando el sistema en tiempo real con el fin de observar si estos dominios se mantenían al apagar el campo magnético. Después de hacer el respectivo análisis de los resultados obtenidos en cada una de las simulaciones se llega a las siguientes conclusiones.

- No se logró observar la formación de dominios magnéticos en ausencia de campo magnético, mientras que si se logra tener una mayor probabilidad de ocupación de una de las componentes dependiendo de las condiciones iniciales.
- Es posible formar dominios magnéticos si se pone al condensado en presencia de un campo magnético.
- El posicionamiento de los dominios magnéticos formados no solo depende de la dirección en la que apunta el campo magnético sino también de su intensidad.
- Los dominios formados con campos magnéticos son estables mientras exista el campo.

Bibliografía

- [1] Mike H Anderson, Jason R Ensher, Michael R Matthews, Carl E Wieman, and Eric A Cornell. Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. *science*, 269(5221):198–201, 1995.
- [2] Cl C Bradley, CA Sackett, JJ Tollett, and Randall G Hulet. Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, 75(9):1687, 1995.
- [3] Kendall B Davis, M-O Mewes, Michael R Andrews, NJ Van Druten, DS Durfee, DM Kurn, and Wolfgang Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75(22):3969, 1995.
- [4] Brian DeMarco and Deborah S Jin. Onset of fermi degeneracy in a trapped atomic gas. *Science*, 285(5434):1703–1706, 1999.
- [5] Christian Gross and Immanuel Bloch. Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices. *Science*, 357(6355):995–1001, 2017.
- [6] R Onofrio, C Raman, JM Vogels, JR Abo-Shaeer, AP Chikkatur, and W Ketterle. Observation of superfluid flow in a bose-einstein condensed gas. *Physical Review Letters*, 85(11):2228, 2000.
- [7] Adriano Amaricci, Antonio Privitera, and Massimo Capone. Inhomogeneous bcs-bec crossover for trapped cold atoms in optical lattices. *Physical Review A*, 89(5):053604, 2014.
- [8] Rudolf Grimm, Matthias Weidemüller, and Yurii B Ovchinnikov. Optical dipole traps for neutral atoms. In *Advances in atomic, molecular, and optical physics*, volume 42, pages 95–170. Elsevier, 2000.

-
- [9] Michael Albiez, Rudolf Gati, Jonas Fölling, Stefan Hunsmann, Matteo Cristiani, and Markus K Oberthaler. Direct observation of tunneling and nonlinear self-trapping in a single bosonic josephson junction. *Physical Review Letters*, 95(1):010402, 2005.
- [10] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *nature*, 415(6867):39, 2002.
- [11] Roger Bowley and Mariana Sanchez. *Introductory statistical mechanics*. Clarendon Press Oxford, 2nd edition, 2001.
- [12] Víctor Romero-Rochín. Equation of state of an interacting bose gas confined by a harmonic trap: The role of the harmonic pressure. *Physical Review Letters*, 94(13):130601, April 2005.
- [13] Alexander L Fetter and John Dirk Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2012.
- [14] Nouredine Zettili. *Quantum mechanics: concepts and applications*. John Wiley & Sons, 2nd edition, 2009.
- [15] Tin-Lun Ho. Spinor bose condensates in optical traps. *Physical Review Letters*, 81(4):742, 1998.
- [16] Maxwell J Mageto, CM Maghanga, and Mghendi Mwamburi. The lorentz oscillator model simulation illustrating a broad maximum in the bulk reflectance for frequencies just above the resonance frequency. *The African Review of Physics*, 7, 2012.
- [17] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Reviews of modern physics*, 80(3):885, 2008.
- [18] Colin V Parker, Li-Chung Ha, and Cheng Chin. Direct observation of effective ferromagnetic domains of cold atoms in a shaken optical lattice. *Nature Physics*, 9(12):769, 2013.

-
- [19] Roberto Antonio Zamora-Zamora. Tesis de doctorado: Excitaciones cuánticas macroscópicas en condensados de bose-einstein: vórtices, skyrmiones y turbulencia. 2018.
- [20] Arthur Mountain. Wick rotation and supersymmetry. *PoS*, page 036, 1999.
- [21] Philipp Bader, Sergio Blanes, and Fernando Casas. 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, 2013.
- [22] Fudziah Ismail Kasim Hussain and Norazak Senu. Runge-kutta type methods for directly solving special fourth-order ordinary differential equations. *Mathematical Problems in Engineering*, 2015,(11):893763, 2015.
- [23] Horacio Martínez Alfaro. *Métodos Numéricos*. Tecnológico de Monterrey, 2004.

Apéndice A

Código del programa

El programa utilizado en el presente trabajo se basa en uno originalmente diseñado por Roberto Antonio Zamora Zamora, modificado en primera instancia por Gustavo Alexis Domínguez Castro, quien otorgó el conocimiento necesario del lenguaje de programación y dió un programa base que resuelve GP escalar unidimensional (3.86) en una trampa armónica el cual fue modificado por el autor de este artículo con ayuda de unas notas de Roberto Zamora. Lo que hizo el autor de este trabajo, fue pasar de resolver GP escalar en una dimensión a GP espinorial en dos dimensiones (4.138) esto con las notas antes mencionadas tomando como potencial externo (V_{ext}) una trampa armónica. Una vez hecho esto se procedió a cambiar el potencial al de una trampa óptica y a introducir los diferentes campos magnéticos. También se cambió el método con el cual se resuelve la ecuación al evolucionar en tiempo imaginario, ya que en el código original se hizo con Euler Semi-implícito y en el código que se presentará más adelante, se hace con Runge Kutta de cuarto orden.

A continuación, se presenta el código con el que se hicieron las simulaciones, el cual está en PyCUDA, cabe resaltar que para cada una de estas se dese deben cambiar ciertos parámetros como llamar a las funciones iniciales correctas y cambiar los campos así que lo que se presenta a continuación es el código general.

A.1. Código principal

```
# Precision
prec = float32
precComplex = complex64
cuPrec = 'float'
cString = 'f'

# caja
Nx = Ny = int32(256)
Lx = Ly = prec(10) |
x_min = prec(-Lx/2.0)
y_min = prec(-Ly/2.0)
dx =prec( Lx/(Nx-1))
dy =prec( Ly/(Ny-1))

# System
gn=prec(3.398/10000)#C0
gs=prec(-1.572/1000000)#C2
B=prec(0)
dtau = prec(0.001)

#Cuda
blockDims2=(32,32,1)
gridDims2 = (Nx//blockDims2[0]+1*(Nx%blockDims2[0]!=0),
             Ny//blockDims2[1]+1*(Nx%blockDims2[1]!=0),1)

from numpy import zeros
from pycuda import gpuarray
from pycuda import autoint
from pyfft.cuda import Plan
from pycuda.compiler import SourceModule
from pycuda.elementwise import ElementwiseKernel
from pycuda.reduction import ReductionKernel
from pycuda import curandom
cudarandom = curandom.XORWOWRandomNumberGenerator()
real_gpu = cudarandom.gen_uniform([Nx,Ny],prec)
gpuFFT2D = Plan((Nx,Ny),dtype=precComplex)
```

```

def compileGPU(stringKernel): #Specific function
    stringKernel = stringKernel.replace('cudaPres', cuPrec)
    stringKernel = stringKernel.replace('cString', cString)
    return SourceModule(stringKernel)
def normalizeGPU2D(psiGPU):
    norm = get_Norm_2D(dx,dy,psiGPU).get()
    norm = 1/sqrt(norm)
    mult_C(norm,psiGPU)
    return norm
def plotState1(psi,a):
    aux=0*psi
    for x in range(0,Nx):
        for y in range (0,Ny):
            aux[y][x]=psi[x][y]
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(4.2,3.3))#siempre va a ser 5,4
    dens = ax.imshow(aux,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
    ax.set_title(a, fontsize=16.5)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=13)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=13)
    ax.set_xlabel(r'x  $\{1\}_{\{0\}}$ ', fontsize=15)
    ax.set_ylabel(r'y  $\{1\}_{\{0\}}$ ', fontsize=15)
    show()
def plotE(x,y):
    fig, ax = plt.subplots(1,1, figsize=(6,4))
    ax.plot(x,y)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=16)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=16)
    xlabel(r'tiempo  $\{\tau\}$ ', fontsize=22)
    ylabel(r'E  $\{E\}_r$ ', fontsize=22)
    ax.grid()
    plt.show()
def plotState(psi):
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(12,12))
    dens = ax.imshow(psi,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
def magnetizacion(psiP,psiM):
    mag = get_Norm_2D(dx,dy,psiP).get() - get_Norm_2D(dx,dy,psiM).get()
    return mag

```

```

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>")

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>")

#Funciones Cuda 1D
get_Norm_2D = 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] * dx*dy",
    reduce_expr = "a+b",
    name = "getintegral_kernel",
    preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")
#esta integra dos funciones psi psi1

get_integral_2D2 = ReductionKernel( precComplex,
    neutral = "0",
    arguments=" {0} dx, {0} dy, pycuda::complex<{0}> *psi,
    pycuda::complex<{0}> *psi1".format(cuPrec),
    map_expr = "abs(conj(psi1[i])*psi[i])* dx*dy",
    reduce_expr = "a+b",
    name = "getintegral2_kernel",
    preamble="#include <pycuda-complex.hpp>")

```

```

Psi2DP_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DZ_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DZ_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_k = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_k2 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DZ_gpu_k2 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_k2 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_k3 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DZ_gpu_k3 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_k3 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DP_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DZ_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
Psi2DM_gpu_new = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)

#initKernel
#Kernels
#psiinicial ffffPP
#psiinicial2 fffffiPP
filekernels = open('kernelsPsiInicial2D.cu')
initKernel = filekernels.read()
filekernels.close()
initKernel = initKernel.replace('cudaPres', cuPrec)
initKernel = initKernel.replace('cString', cString)
cudaCompile = SourceModule(initKernel)
initGPU = cudaCompile.get_function( "psiinicial2" )
initGPU.prepare('ffffiPP')

#Kernels
filekernels = open('kernelsSpin2D1a2.cu')
relax = filekernels.read()
filekernels.close()
relaxK = compileGPU(relax)
getNablaPSI2D = relaxK.get_function('applyNablaSquare')
stepRk42D = relaxK.get_function('rk4TiempoI')
getEnergyGPU = relaxK.get_function('energy_kernel')
CFrontera = relaxK.get_function('Frontera')
getNablaPSI2D.prepare('iifffP')
stepRk42D.prepare(cString*12+'PPPPPPPPPPPP')
getEnergyGPU.prepare('ffffffffffPPPPPP')
CFrontera.prepare('ffffPPP')

```

```
# Calling function, executing
initGPU.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    prec(dx), prec(dy),
    prec(x_min),prec(y_min),1,
    real_gpu.gpudata,Psi2DP_gpu.gpudata)
initGPU.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    prec(dx),prec(dy),
    prec(x_min),prec(y_min),1,
    real_gpu.gpudata,Psi2DZ_gpu.gpudata)
initGPU.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    prec(dx),prec(dy),
    prec(x_min),prec(y_min),-1,
    real_gpu.gpudata,Psi2DM_gpu.gpudata)
CFrontera.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    x_min,y_min,
    dx,dy,
    Psi2DP_gpu.gpudata,
    Psi2DZ_gpu.gpudata,
    Psi2DM_gpu.gpudata)

NR=get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DP_gpu).get()
+get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DZ_gpu).get()
+get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DM_gpu).get()

mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DP_gpu)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DZ_gpu)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DM_gpu)
plotState(abs(Psi2DZ_gpu.get())**2)

copy_C(Psi2DP_gpu,Psi2DP_gpu_new)
copy_C(Psi2DP_gpu,Psi2DP_gpu_k)

copy_C(Psi2DZ_gpu,Psi2DZ_gpu_new)
copy_C(Psi2DZ_gpu,Psi2DZ_gpu_k)

copy_C(Psi2DM_gpu,Psi2DM_gpu_new)
copy_C(Psi2DM_gpu,Psi2DM_gpu_k)
```

```
def getEnergyState2D():

    copy_C(Psi2DP_gpu,Psi2DP_gpu_k3)
    copy_C(Psi2DZ_gpu,Psi2DZ_gpu_k3)
    copy_C(Psi2DM_gpu,Psi2DM_gpu_k3)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu,Psi2DP_gpu_k3)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu,Psi2DZ_gpu_k3)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu,Psi2DM_gpu_k3)

    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DP_gpu_k3.gpudata)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k3.gpudata)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k3.gpudata)

    #YA 2D
    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k3, inverse=True)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k3, inverse=True)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k3, inverse=True)

    getEnergyGPU.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                x_min, y_min, dx, dy, gn, gs, B,
                                Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu.gpudata,
                                Psi2DM_gpu.gpudata,
                                Psi2DP_gpu_k3.gpudata, Psi2DZ_gpu_k3.gpudata,
                                Psi2DM_gpu_k3.gpudata)#YA 2D

    energy = get_integral_2D(dx,dy,Psi2DP_gpu_k3).get()
    energy += get_integral_2D(dx,dy,Psi2DZ_gpu_k3).get()
    energy += get_integral_2D(dx,dy,Psi2DM_gpu_k3).get()

    return energy

getEnergyState2D()
```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k,Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

t=0
stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        prec(0), prec(0.5), prec(1/6.),prec(t),dtau,
                        x_min,y_min, dx,dy, gn, gs, B,
                        Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k,Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

```

```

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        prec(0.5), prec(0.5), prec(2/6.), prec(t), dtau,
                        x_min, y_min, dx, dy, gn, gs, B,
                        Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k, Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k, Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k, Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

```

```

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        prec(0.5), prec(1), prec(2/6.), prec(t), dtau,
                        x_min, y_min, dx, dy, gn, gs, B,
                        Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k, Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        prec(1), prec(0), prec(1/6.),prec(t),dtau,
                        x_min,y_min, dx,dy, gn, gs, B,
                        Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

CFrontera.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        x_min,y_min,
                        dx,dy,
                        Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_new.gpudata)

NR=get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DP_gpu_new).get()
  +get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DZ_gpu_new).get()
  +get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DM_gpu_new).get()
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DP_gpu_new)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DZ_gpu_new)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DM_gpu_new)

copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu)
copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu_k)
copy_C(Psi2DZ_gpu_new,Psi2DZ_gpu)
copy_C(Psi2DZ_gpu_new,Psi2DZ_gpu_k)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu_k)

t += dtau

```

```

def fftRk4Step():
    global t
    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k,Psi2DP_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

    stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                            prec(0), prec(0.5), prec(1/6.),prec(t),dtau,
                            x_min,y_min, dx,dy, gn, gs, B,
                            Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                            Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                            Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                            Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                            Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                            Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k,Psi2DP_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
    getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                                Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
    gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

```

```

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    prec(0.5), prec(0.5), prec(2/6.), prec(t), dtau,
    x_min, y_min, dx, dy, gn, gs, B,
    Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
    Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
    Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
    Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
    Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
    Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k, Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k, Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k, Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    prec(0.5), prec(1), prec(2/6.), prec(t), dtau,
    x_min, y_min, dx, dy, gn, gs, B,
    Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
    Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
    Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
    Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
    Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
    Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k, Psi2DP_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
    Nx, Ny, Lx, Ly, Psi2DP_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DP_gpu_k2, inverse=True)

```

```

gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k,Psi2DZ_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DZ_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DZ_gpu_k2, inverse=True)

gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k,Psi2DM_gpu_k2)
getNablaPSI2D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                             Nx,Ny,Lx,Ly,Psi2DM_gpu_k2.gpudata)
gpuFFT2D.execute(Psi2DM_gpu_k2, inverse=True)

stepRk42D.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        prec(1), prec(0), prec(1/6.),prec(t),dtau,
                        x_min,y_min, dx,dy, gn, gs, B,
                        Psi2DP_gpu.gpudata, Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DP_gpu_k.gpudata, Psi2DP_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu.gpudata, Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_k.gpudata, Psi2DZ_gpu_k2.gpudata,
                        Psi2DM_gpu.gpudata, Psi2DM_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_k.gpudata, Psi2DM_gpu_k2.gpudata)

CFrontera.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                        x_min,y_min,
                        dx,dy,
                        Psi2DP_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DZ_gpu_new.gpudata,
                        Psi2DM_gpu_new.gpudata)

NR=get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DP_gpu_new).get()
  +get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DZ_gpu_new).get()
  +get_Norm_2D(dx,dy,Psi2DM_gpu_new).get()
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DP_gpu_new)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DZ_gpu_new)
mult_C(1/sqrt(NR),Psi2DM_gpu_new)

copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu)
copy_C(Psi2DP_gpu_new,Psi2DP_gpu_k)
copy_C(Psi2DZ_gpu_new,Psi2DZ_gpu)
copy_C(Psi2DZ_gpu_new,Psi2DZ_gpu_k)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu)
copy_C(Psi2DM_gpu_new,Psi2DM_gpu_k)

t += dtau

```

```

%%time
e = []
m = []
time = []
for i in range(600):
    for j in range(1500): fftRk4Step()
    e.append(getEnergyState2D())
    m.append(magnetizacion(Psi2DP_gpu,Psi2DM_gpu))
    time.append(dttau*100*(i+1))

plotE(time,array(m).real)
plotE(time,array(e).real)
plotState1(abs(Psi2DP_gpu.get())**2,1)
plotState1(abs(Psi2DZ_gpu.get())**2,0)
plotState1(abs(Psi2DM_gpu.get())**2,-1)
magnetizacion(Psi2DP_gpu,Psi2DM_gpu)

%%time
e1 = []
time1 = []
for i in range(50):
    for j in range(10): fftRk4Step()
    e1.append(getEnergyState2D())
    time1.append(dttau*100*(i+1))
plotE(time1,array(e1).real)

#Psi2DP_gpu_new1 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
#Psi2DZ_gpu_new1 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)
#Psi2DM_gpu_new1 = gpuarray.zeros([Nx,Ny], dtype=precComplex)

#copy_C(Psi2DP_gpu,Psi2DP_gpu_new1)
#copy_C(Psi2DZ_gpu,Psi2DZ_gpu_new1)
#copy_C(Psi2DM_gpu,Psi2DM_gpu_new1)

copy_C(Psi2DP_gpu_new1,Psi2DP_gpu)
copy_C(Psi2DZ_gpu_new1,Psi2DZ_gpu)
copy_C(Psi2DM_gpu_new1,Psi2DM_gpu)

```

```

def plotState2(psi,a,b):
    aux=0*psi
    for x in range(0,Nx):
        for y in range (0,Ny):
            aux[y][x]=psi[x][y]
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(7,5),dpi=150)#siempre va a ser 5,4
    dens = ax.imshow(aux,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
    ax.set_title(r'${ \left| { \psi }_{ 1 } \right| } ^{ 2 }$',
    fontsize=16.5)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=13)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=13)
    ax.set_xlabel(r'x $({1}_{0})$', fontsize=15)
    ax.set_ylabel(r'y $({1}_{0})$', fontsize=15)
    c=t*7.848611/100000
    savefig('./imagenes/Psi1_'+str(b)+'.png')
    text(-3.3,6, 'tiempo (s) =', fontsize=16)
    text(0.6,6, c, fontsize=16)
    show()

def plotState3(psi,a,b):
    aux=0*psi
    for x in range(0,Nx):
        for y in range (0,Ny):
            aux[y][x]=psi[x][y]
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(7,5),dpi=150)#siempre va a ser 5,4
    dens = ax.imshow(aux,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
    ax.set_title(r'${ \left| { \psi }_{ -1 } \right| } ^{ 2 }$',
    fontsize=16.5)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=13)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=13)
    ax.set_xlabel(r'x $({1}_{0})$', fontsize=15)
    ax.set_ylabel(r'y $({1}_{0})$', fontsize=15)
    c=t*7.848611/100000
    text(-3.3,6, 'tiempo (s) =', fontsize=16)
    text(0.6,6, c, fontsize=16)
    savefig('./imagenes/Psi-1_'+str(b)+'.png')

```

```

def plotState4(psi,a,b):
    aux=0*psi
    for x in range(0,Nx):
        for y in range (0,Ny):
            aux[y][x]=psi[x][y]
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(7,5),dpi=150)#siempre va a ser 5,4
    dens = ax.imshow(aux,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
    ax.set_title(r'${ \left| { \zeta }_{ 1 } \right| }$',
    fontsize=16.5)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=13)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=13)
    ax.set_xlabel(r'x $({1}_{0})$', fontsize=15)
    ax.set_ylabel(r'y $({1}_{0})$', fontsize=15)
    c=t*7.848611/100000
    text(-3.3,6, 'tiempo (s) =', fontsize=16)
    text(0.6,6, c, fontsize=16)
    savefig('./imagenesa/S1_'+str(b)+'.png')

def plotState5(psi,a,b):
    aux=0*psi
    for x in range(0,Nx):
        for y in range (0,Ny):
            aux[y][x]=psi[x][y]
    f,ax = subplots(1,1, figsize=(7,5),dpi=150)#siempre va a ser 5,4
    dens = ax.imshow(aux,extent=[x_min,-x_min,y_min,-y_min],
    cmap='magma', origin='lower')
    cb = colorbar(dens)
    ax.set_title(r'${ \left| { \zeta }_{ -1 } \right| }$',
    fontsize=16.5)
    setp(ax.get_xticklabels(), fontsize=13)
    setp(ax.get_yticklabels(), fontsize=13)
    ax.set_xlabel(r'x $({1}_{0})$', fontsize=15)
    ax.set_ylabel(r'y $({1}_{0})$', fontsize=15)
    c=t*7.848611/100000
    text(-3.3,6, 'tiempo (s) =', fontsize=16)
    text(0.6,6, c, fontsize=16)
    savefig('./imagenesa1/S-1_'+str(b)+'.png')

```

```
%%time
t=0
plotState2(abs(Psi2DP_gpu.get())**2,1,-1)
plotState3(abs(Psi2DM_gpu.get())**2,-1,-1)
plotState4(abs(spinorP_gpu.get())**2,1,-1)
plotState5(abs(spinorM_gpu.get())**2,-1,-1)
for i in range(600):
    for k in range(80):
        for j in range(50): fftRk4Step()
        spinores.prepared_call(gridDims2, blockDims2,
                               x_min,y_min,
                               dx,dy,
                               Psi2DP_gpu.gpudata,
                               Psi2DZ_gpu.gpudata,
                               Psi2DM_gpu.gpudata,
                               spinorP_gpu.gpudata,
                               spinorZ_gpu.gpudata,
                               spinorM_gpu.gpudata,
                               RO_gpu.gpudata)
        plotState2(abs(Psi2DP_gpu.get())**2,1,i)
        plotState3(abs(Psi2DM_gpu.get())**2,-1,i)
        plotState4(abs(spinorP_gpu.get())**2,1,i)
        plotState5(abs(spinorM_gpu.get())**2,-1,i)
```

A.2. Códigos secundarios

El código principal llama a dos archivos, **kernelsPsiInicial2D.cu** y **kernelsSpin2D1a2.cu**, estos archivos son funciones en CUDA cuyo lenguaje de programación es c, a continuación se presenta el respectivo código de estos archivos.

A.2.1. Código kernelsSpin2D1a2.cu

```
#include <pycuda-complex.hpp>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#define pi 3.14159265
__device__ cudaPres KspaceFFT(int tid, int nPoint, cudaPres L){
cudaPres Kfft;
if (tid < nPoint/2){
    Kfft = 2.0f*pi*(tid)/L;
}
else {
Kfft = 2.0f*pi*(tid-nPoint)/L;
}
return Kfft;}
__device__ cudaPres Vext(cudaPres x, cudaPres y,
                        cudaPres xMin, cudaPres yMin){
cudaPres vex = 10*(sin(x*pi+pi/2)*sin(x*pi+pi/2)
                  + sin(y*pi+pi/2)*sin(y*pi+pi/2));
return vex;}
__device__ cudaPres CampoB1(cudaPres x, cudaPres y){
cudaPres B;
if (x*y>0){
    B=1;}
else{
    B=-1;}
return B;}
__device__ cudaPres CampoB(cudaPres x, cudaPres y){
cudaPres B = sin(pi*x/5);
return B;}
```

```

__global__ void Frontera(  cudaPres xMin, cudaPres yMin,
                          cudaPres dx, cudaPres dy,
                          pycuda::complex<cudaPres> *psiP_new,
                          pycuda::complex<cudaPres> *psiZ_new,
                          pycuda::complex<cudaPres> *psiM_new){

// Index for thread
int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
cudaPres x = t_i*dx + xMin;
cudaPres y = t_j*dy + yMin;
//cudaPres t = time + dt*at;
pycuda::complex<cudaPres> psip = psiP_new[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psiz = psiZ_new[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psim = psiM_new[tid];

if (x==0 || x==2*xMin ){
psiP_new[tid] = 0;
psiZ_new[tid] = 0;
psiM_new[tid] = 0;
}
if (y==0 || y==2*yMin ){
psiP_new[tid] = 0;
psiZ_new[tid] = 0;
psiM_new[tid] = 0;
}

}

__global__ void applyNablaSquare( int nPointX, int nPointY,
                                cudaPres Lx, cudaPres Ly,
                                pycuda::complex<cudaPres> *fftpsi){

// Index for thread
int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
cudaPres k2 = 0.0;
cudaPres kAux = KspaceFFT(t_i,nPointX, Lx);//kx[t_j];
k2 += kAux*kAux;
kAux = KspaceFFT(t_j,nPointY, Ly);//ky[t_i];
k2 += kAux*kAux;
fftpsi[tid] *= -k2;
}

```

```

__global__ void rk4TiempoI( cudaPres at, cudaPres ak, cudaPres apsi,
                           cudaPres time, cudaPres dt,
                           cudaPres xMin, cudaPres yMin,
                           cudaPres dx, cudaPres dy,
                           cudaPres c0, cudaPres c2, cudaPres B,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiP_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiP_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauPx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauPx2,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiZ_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiZ_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauZx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauZx2,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiM_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiM_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauMx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauMx2){

// Index for thread
int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
cudaPres x = t_i*dx + xMin;
cudaPres y = t_j*dy + yMin;
//cudaPres t = time + dt*at;

pycuda::complex<cudaPres> kiAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> liAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> niAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> pAux = kauPx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> zAux = kauZx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> mAux = kauMx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psip = psiP_old[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psiz = psiZ_old[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psim = psiM_old[tid];

```

```

// Calculating ki

// m=1
kiAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * pAux ;
kiAux += ((c0+c2)*(conj(pAux)*pAux+conj(zAux)*zAux)+c0*conj(mAux)*mAux)*pAux;
kiAux += c2*conj(mAux)*zAux*zAux;
//campo B
kiAux += -345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*pAux;
// Kinetic
kiAux += -0.5cString *0.202642cString* kauPx2[tid];
// ki
kiAux *= -1;

//m=0
liAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * zAux ;
liAux += ((c0+c2)*(conj(pAux)*pAux+conj(mAux)*mAux)+c0*conj(zAux)*zAux)*zAux;
liAux += 2*c2*conj(zAux)*pAux*mAux;
// Kinetic
liAux += -0.5cString *0.202642cString* kauZx2[tid];
// ki
liAux *= -1;

//m=-1
niAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * mAux ;
niAux += ((c0+c2)*(conj(mAux)*mAux+conj(zAux)*zAux)+c0*conj(pAux)*pAux)*mAux;
niAux += c2*conj(pAux)*zAux*zAux;
//campo B
niAux += 345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*mAux;
// Kinetic
niAux += -0.5cString *0.202642cString* kauMx2[tid] ;
// ki
niAux *= -1;

// psi_aux for next k_i+1
kauPx[tid] = psip + ak * dt * kiAux;
kauZx[tid] = psiz + ak * dt * liAux;
kauMx[tid] = psim + ak * dt * niAux;

// Cumulative new state
psiP_new[tid] += apsi * dt * kiAux;
psiZ_new[tid] += apsi * dt * liAux;
psiM_new[tid] += apsi * dt * niAux;
}

```

```

__global__ void rk4TiempoR( cudaPres at, cudaPres ak, cudaPres apsi,
                           cudaPres time, cudaPres dt,
                           cudaPres xMin, cudaPres yMin,
                           cudaPres dx, cudaPres dy,
                           cudaPres c0, cudaPres c2, cudaPres B,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiP_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiP_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauPx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauPx2,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiZ_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiZ_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauZx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauZx2,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiM_old,
                           pycuda::complex<cudaPres> *psiM_new,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauMx,
                           pycuda::complex<cudaPres> *kauMx2){

// Index for thread
int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
cudaPres x = t_i*dx + xMin;
cudaPres y = t_j*dy + yMin;
//cudaPres t = time + dt*at;

pycuda::complex<cudaPres> kiAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> liAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> niAux =0;
pycuda::complex<cudaPres> pAux = kauPx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> zAux = kauZx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> mAux = kauMx[tid];
pycuda::complex<cudaPres> iComplex(0,1.0cString);
pycuda::complex<cudaPres> psip = psiP_old[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psiz = psiZ_old[tid];
pycuda::complex<cudaPres> psim = psiM_old[tid];

```

```

// Calculating ki

// m=1
kiAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * pAux ;
kiAux += ((c0+c2)*(conj(pAux)*pAux+conj(zAux)*zAux)+c0*conj(mAux)*mAux)*pAux;
kiAux += c2*conj(mAux)*zAux*zAux;
//campo B
kiAux += -345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*pAux;
// Kinetic
kiAux += -0.5cString *0.202642cString* kauPx2[tid];
// ki
kiAux *= -iComplex;

//m=0
liAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * zAux ;
liAux += ((c0+c2)*(conj(pAux)*pAux+conj(mAux)*mAux)+c0*conj(zAux)*zAux)*zAux;
liAux += 2*c2*conj(zAux)*pAux*mAux;
// Kinetic
liAux += -0.5cString *0.202642cString* kauZx2[tid];
// ki
liAux *= -iComplex;

//m=-1
niAux = Vext( x, y, xMin, yMin) * mAux ;
niAux += ((c0+c2)*(conj(mAux)*mAux+conj(zAux)*zAux)+c0*conj(pAux)*pAux)*mAux;
niAux += c2*conj(pAux)*zAux*zAux;
//campo B
niAux += 345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*mAux;
// Kinetic
niAux += -0.5cString *0.202642cString* kauMx2[tid] ;
// ki
niAux *= -iComplex;

// psi_aux for next k_i+1
kauPx[tid] = psip + ak * dt * kiAux;
kauZx[tid] = psiz + ak * dt * liAux;
kauMx[tid] = psim + ak * dt * niAux;

// Cumulative new state
psiP_new[tid] += apsi * dt * kiAux;
psiZ_new[tid] += apsi * dt * liAux;
psiM_new[tid] += apsi * dt * niAux;
}

```

```

__global__ void energy_kernel( cudaPres xMin, cudaPres yMin,
                               cudaPres dx, cudaPres dy,
                               cudaPres gn, cudaPres gs, cudaPres B,
                               pycuda::complex<cudaPres> *psip,
                               pycuda::complex<cudaPres> *psiz,
                               pycuda::complex<cudaPres> *psim,
                               pycuda::complex<cudaPres> *V2psip,
                               pycuda::complex<cudaPres> *V2psiz,
                               pycuda::complex<cudaPres> *V2psim){

    // Index for thread
    int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
    int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
    int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
    cudaPres x = t_i*dx + xMin;
    cudaPres y = t_j*dy + yMin;

    pycuda::complex<cudaPres> psi1, psi0, psim1;
    psi1 = psip[tid];
    psi0 = psiz[tid];
    psim1= psim[tid];
    pycuda::complex<cudaPres> kiAux;

    // m=1
    // Kinetic
    kiAux = -0.5cString *0.202642cString* V2psip[tid];
    // Trap
    kiAux += Vext( x, y, xMin, yMin) *psi1;
    // NL
    kiAux += (gn+gs)*(psi1*conj(psi1)+psi0*conj(psi0))*psi1;
    kiAux += (gn-gs)*psim1*conj(psim1)*psi1;
    kiAux += gs*psi0*psi0*conj(psim1);
    kiAux += 345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*psi1;
    // k1
    kiAux *= conj(psi1);
    V2psip[tid]=kiAux;

```

```
// m=0
// Kinetic
kiAux = -0.5cString *0.202642cString* V2psiz[tid];
// Trap
kiAux += Vext( x, y, xMin, yMin) *psi0;
// NL
kiAux += (gn+gs)*(psi1*conj(psi1)+psim1*conj(psim1))*psi0;
kiAux += gn*psi0*conj(psi0)*psi0;
kiAux += 2.0cString*gs*psi1*psim1*conj(psi0);
// k1
kiAux *= conj(psi0);
V2psiz[tid]=kiAux;

// m=-1
// Kinetic
kiAux = -0.5cString *0.202642cString* V2psim[tid];
// Trap
kiAux += Vext( x, y, xMin, yMin) *psim1;
// NL
kiAux += (gn+gs)*(psi0*conj(psi0)+psim1*conj(psim1))*psim1;
kiAux += (gn-gs)*psi1*conj(psi1)*psim1;
kiAux += gs*psi0*psi0*conj(psi1);
kiAux += 345.1079375cString*B*CampoB(x,y)*psim1;
// k1
kiAux *= conj(psim1);
V2psim[tid]=kiAux;

}
```

A.2.2. Código kernelsPsiInicial2D.cu

```
#include <pycuda-complex.hpp>
__global__ void psiinicial1( cudaPres dx, cudaPres dy,
    cudaPres xMin, cudaPres yMin,
    cudaPres *rndReal, pycuda::complex<cudaPres> *psi){
    // Index for thread
    int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
    int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
    int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
    // Indices to coordinates
    cudaPres x = t_i*dx + xMin;
    cudaPres y = t_j*dy + yMin;
    pycuda::complex<cudaPres> auxC;
    cudaPres aux = exp(-0.09*x*x)*exp(-0.09*y*y);
    auxC._M_re = aux + aux*(rndReal[tid]-0.5cString);
    psi[tid] = auxC;
}

__global__ void psiinicial2( cudaPres dx, cudaPres dy,
    cudaPres xMin, cudaPres yMin, int a,
    cudaPres *rndReal, pycuda::complex<cudaPres> *psi){
    // Index for thread
    int t_i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x;
    int t_j = blockIdx.y*blockDim.y + threadIdx.y;
    int tid = gridDim.y * blockDim.y * t_i + t_j;
    // Indices to coordinates
    cudaPres x = t_i*dx + xMin;
    cudaPres y = t_j*dy + yMin;
    pycuda::complex<cudaPres> auxC;
    cudaPres aux = exp(-0.18*pow((x+a*xMin/2),2)-0.18*pow(y,2));
    auxC._M_re = aux + aux*(rndReal[tid]-0.5cString);
    psi[tid] = auxC;
}
```