

# De la ecuación de Schrodinger a Gross-Pitaevskii

# 1. Introducción a la Mecánica Cuántica

## 2. Soluciones a la ecuación de Schrodinger

En esta sección estudiaremos soluciones a la ecuación de Schrodinger.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left( -\hbar^2/2m \vec{\nabla}^2 + V_{\text{trap}}(r) \right) \Psi \quad (1)$$

### 2.1. Movimiento libre

Primero analizaremos la ec. (1) imponiendo que  $V_{\text{trap}} = 0$ , por tanto nos queda una ecuación:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left( -\hbar^2/2m \vec{\nabla}^2 \right) \Psi \quad (2)$$

en este caso podemos hacer una analogía al movimiento libre de una partícula. Podemos comprobar que dado este sistema el Hamiltoniano commuta con el operador momento  $p = -i\hbar \vec{\nabla}$ , por lo tanto si hacemos la transformada de Fourier de nuestro paquetes de ondas debe ser un estado propio de nuestro sistema, por el cual no observaremos dispersión.

$$\Psi(k) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ikx} dx \quad (3)$$

En mecánica cuántica el valor medio de un operador  $A$  se define como:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) A \Psi(x) dx \quad (4)$$

Así la dispersión del operador  $A$  la definimos como:  $\sigma = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

### 2.2. Oscilador armónico

En este punto introduciremos un potencial externo a la ecuación de Schrodinger, que será el famoso potencial armónico:  $V_{\text{trap}} = \frac{1}{2} mw^2 x^2$ .

Nuestro objetivo será obtener las autofunciones y autovalores del Hamiltoniano, para ello resolvemos la ecuación (1). No nos centraremos en el método a seguir para encontrar esta soluciones, simplemente mencionamos que se pueden obtener llevando un desarrollo en serie de potencias. Así obtenemos la familia de soluciones:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left(\frac{mw}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{mwx^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

donde  $H_n$  son los polinomios de Hermite:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (6)$$

Y obtenemos unos niveles de energía:

$$E_n = \hbar w \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (7)$$

Este resultado es muy importante en la mecánica cuántica. Ya que nos muestra una cuantización en la energía, así que tendremos distintos niveles de energía posibles en nuestro estado.

## 3. Simulación: ecuación de Schrodinger

### 3.1. Movimiento libre

Para inicializar la simulación donde veremos soluciones a la ec. (1) entramos en la sección *WavePack Dispersion*.

Para observar un movimiento libre seleccionamos el botón *No* en *Harmonic*, con el slider *Initial position Wavepack* podemos seleccionar la posición inicial de nuestro paquete de ondas. En *excitation of the state* seleccionamos uno de los autoestados dados por la ec. (5) y *Number of oscilations* nos permite controlar el tiempo de la simulación, este tiempo está escalado con el periodo del paquete de ondas bajo un potencial de  $w = 1$ , ahora seleccionamos el botón *START*. Una vez terminada la computación, principalmente nos interesará la ventana *DISPERSION*. En ella se muestra el cálculo de la dispersión para la función de onda en el espacio R y K, vemos como incrementa con el tiempo para R y constante para K. Seguidamente podemos ver la evolución de nuestro estado. Utilizando el slider debajo de la gráfica o los botones *GO ON*, *GO BACK*, *PAUSE* podemos controlar la evolución del estado. Vemos como ciertamente nuestra función de onda en el espacio K no sufre ningún tipo de dispersión pero en el espacio R sí.

### 3.2. Oscilador armónico

Para activar el movimiento oscilatorio armónico solamente debemos prensionar el botón *YES* en *HARMONIC*. En esta sección nos centraremos en dos puntos:

- (I) Comprobar que el paquete de ondas sigue un movimiento oscilatorio armónico.
- (II) Comprobar la cuantización de la energía dada por la ec. (7).

Para obtener los resultados del apartado (I) posicionaremos el paquete de ondas en una posición diferente de 0, se puede elegir el nivel de excitación que uno desee y ejecutaremos el programa para un tiempo dado. Una vez haya terminado la computación podemos seleccionar la gráfica *ENERGY*. En ella podemos ver tres valor de la energía: cinética, potencial y total. Podemos observar una oscilación como la que cumpliría una partícula bajo un potencial armónico, como la de la Fig. 1 . Ahora entramos en la evo-

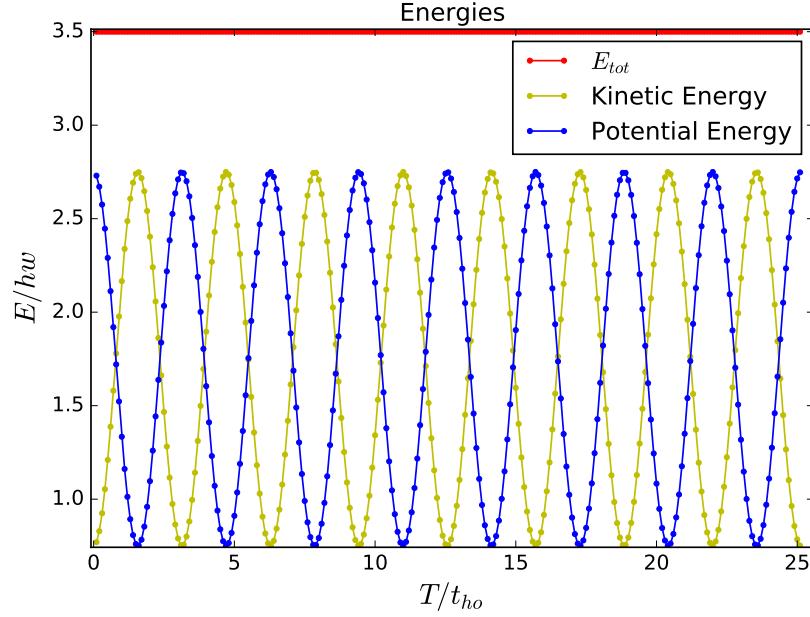


Figura 1: Energías para una función de onda sometida a un potencial armónico

lución del estado, ya se ha comentado anteriormente como entrar. En él, podemos ver completamente un movimiento oscilatorio. Vemos que, cuando la función de onda en el espacio R está en un extremo, en el espacio K está en 0 y a la inversa, muestra de un movimiento oscilatorio. En este punto uno sería capaz de extraer el período del movimiento entrando en *MEAN VALUE* donde está calculado el valor medio de la posición del paquete siguiendo la ec (4) y así compararlo con el resultado teórico.

Ahora analicemos el punto (II). La configuración inicial adecuada sería: poner el paquete de ondas en la posición 0, introducir un tiempo que queramos y, lo más importante seleccionar el nivel de excitación, empezaremos con el nivel 0. Una vez finalizados los cálculos entramos en *ENERGY*, esta vez, nos interesa la energía total. Ahora podemos comparar este valor con el dado por la ec. (7) para  $n = 0$ , ahora reiteramos para  $n = 1, 2$ . También podemos comprobar viendo la evolución del estado que es un propio y por lo tanto, estacionario.

## 4. Gross-Pitaevskii (régimen No-lineal)

### 4.1. Condensados de Bose-Einstein y ecuación de Gross-Pitaevskii

Los bosones están caracterizados por no cumplir el principio de exclusión de Pauli, es decir, distintos bosones pueden ocupar el mismo estado cuántico, totalmente opuesto a los fermiones. Cuando se tiene un sistema bosónico, y a éste se le disminuye la temperatura hasta llegar cerca del 0 absoluto (-273.15 C) forman un nuevo estado de la materia llamado la condensación de Bose-Einstein. Se caracteriza por la ocupación ,de una gran parte de la fracción de bosones, del estado cuántico fundamental. Este fenómeno nos lleva a tener un estado cuántico macróscopico, donde podemos caracterizar nuestro sistema por una única función de onda.

Dado este sistema de  $N$  bosones. Si ahora consideramos que la interacción entre los bosones es de contacto entre dos cuerpos, y que la separación entre dos bosones es mayor que la *scattering lenght*, podemos efectuar la siguiente aproximación:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)\dots\psi(\mathbf{r}_N) \quad (8)$$

Con esto podemos escribir nuestro Hamiltoniano de la forma siguiente:

$$H = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + V_{trap}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (9)$$

Donde  $m$  es la masa de un bosón,  $a_s$  es la *boson-boson scattering lenght* y  $\delta(\mathbf{r})$  es la delta de Dirac.

En este punto podemos escribir la ecuación de Gross-Pitaevskii (independiente del tiempo):

$$\mu\Psi(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{trap}(\mathbf{r}) + g|\Psi(\mathbf{r})|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}) \quad (10)$$

Donde  $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$  que es proporcional al *scattering lenght* y  $\mu$  es el potencial químico. El cual se puede encontrar con la condición de normalización de la función de onda:

$$N = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (11)$$

Vemos como la ecuación de Gross-Pitaevskii es una ecuación diferencial no-lineal. Vemos que la no-linealidad la introduce el término que va con  $g$ . Por tanto, vemos que para el caso  $g = 0$  recuperamos la ec. (1), lo que nos lleva a que las soluciones de la ecuación de Gross-Pitaevskii son la continuación no-lineal de las de Schrodinger.

## 4.2. Aproximación Thomas-Fermi y solitones oscuros

Apartir de ahora supondremos un régimen 1D. La primera solución que podemos hallar en la ec. (10) es haciendo la aproximación siguiente: Suponemos tener un gran número de partículas, lo que lleva a que el término interatómico se haga muy grande, así podemos despreciar el término cinético. Una vez hecho esto, la ecuación a resolver es trivial, con solución:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\mu - V_{trap}(x)}{gN}} \quad (12)$$

Otro tipo de solución a la ec. (10) son los solitones. Depende del tipo de interacción, si es atractiva o repulsiva podemos tener solitones brillantes o oscuros, respectivamente. Para una interacción repulsiva tenemos:

$$\psi(x) = \psi_0 \tanh \frac{x}{\sqrt{2}\xi} \quad (13)$$

Donde  $\psi_0$  es la solución a la ec. (10) sin solitón y  $\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mgN}}$  es la llamada *healing length*

Esta última solución tiene un especial interés. Vemos que los solitones oscuros producen un punto de cero densidad. Estos objetos son un defecto topológico del sistema, se puede observar que producen un cambio en la función de onda. En concreto, producen un salto de fase  $\pi$  en el punto donde se hallan.

**4.3. Solitones Oscuros bajo un potencial armónico**

**4.4. Péndulo de Newton cuántico**

## 5. Simulación: GP-ecuación

### 5.1. Continuación no-lineal

En esta sección se comprobaremos que las soluciones a la ec. (10) simplemente son una continuación no-lineal de las soluciones a la ec. (1). Es decir, que haciendo tender  $g \rightarrow 0$  recuperamos las soluciones lineales. Para ello entramos en la simulación *DarkSolitons*. Nada más entrar podemos observar un condensado de Bose-Einstein para  $\mu = 42$  y su aproximación Thomas-Fermi. Apretamos el botón *Lineal continuation* y veremos que se desplega una caja donde seleccionar el número de excitación. Es decir, recordando la cuantización de la energía (7), podemos seleccionar el estado lineal con el cual queremos observar la evolución de la no-linealidad. Una vez terminado el tiempo de computación, podemos presionar sobre *CHEMICAL POTENTIAL*. En esta gráfica podemos observar el valor del potencial químico a medida que aumentamos el valor de  $g_{int}$ . Podemos comprobar que para valores nulos de la no-linealidad recuperamos el resultado predecido por la ec. (7). El método para entrar en la evolución del estado es el mismo que en la simulación *WavePackDispersion*. Aquí veremos como nuestro estado evoluciona a medida que aumentamos el valor de  $g_{int}$ , es decir, tenemos una visión directa de como afecta la no-linealidad de nuestro estado. Este proceso se puede iterar para las diferentes excitaciones posibles que da el programa. Así, recopilando los datos, podemos obtener una figura como la Fig. 2

### 5.2. Solitón oscuro bajo un potencial armónico

Ahora veremos el comportamiento de estos defectos topológicos bajo un potencial armónico. Como hemos visto estos objetos se comportan como una partícula con una masa asociada (negativa), aquí comprobaremos este hecho. En primer lugar presionamos el botón *Dark solitons study*. Introducimos la posición inicial del solitón, el número de oscilaciones que queremos que de e introduciremos en *Number of symmetric solitons* = 1. Presionamos ahora el botón *START* y esperamos a que finalice el tiempo de computación. Ahora podemos entrar en el apartado *MINUS*, en el vemos una gráfica donde se representa nuestro condensado para diferentes instantes de tiempo. En el podemos extraer el periodo de oscilación de nuestro solitón y con el podríamos extraer su masa asociada. En el apartado *PHASE* podemos comprobar que un solitón es un defecto topológico. En esta gráfica se representa la diferencia

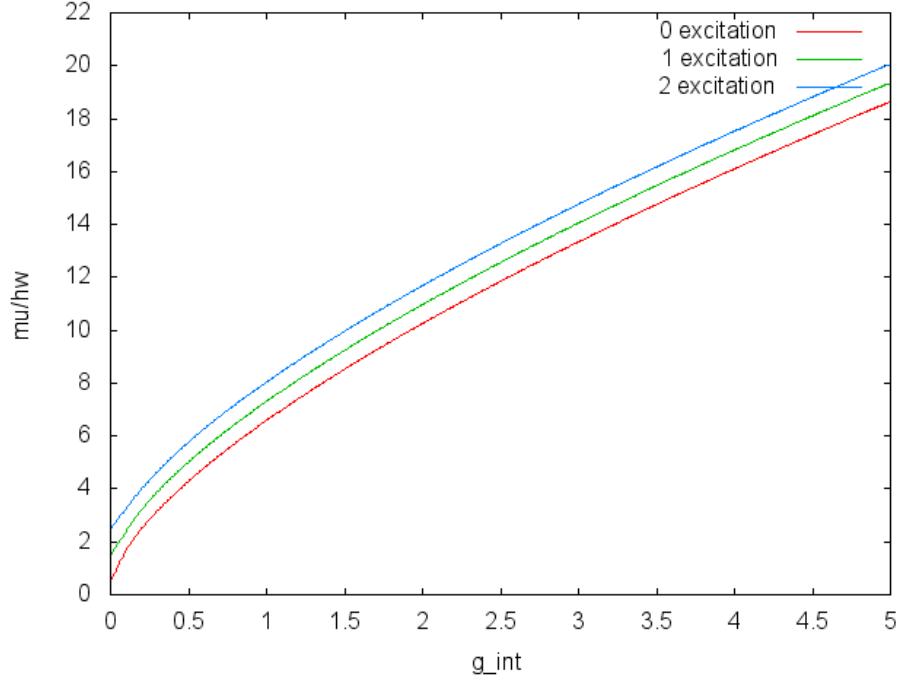


Figura 2: Potencial químico para diferentes estados en su evolución en la no-linealidad

de fase entre la parte derecha del solitón y la parte izquierda, como se ha mencionado en teoría, se introduce un cambio de fase  $\pi$  pero como el solitón al oscilar adquiere velocidad este ya no introduce un 0 en la densidad, por lo tanto este cambio de fase es menor. Por último podemos entrar en la evolución del estado y veremos como el solitón oscila con el tiempo.

### 5.3. Interacción entre dos solitones oscuros bajo un potencial armónico

Como ya se ha mencionado, la interacción entre dos solitones es repulsiva, ahora comprobaremos esta interacción en presencia de un potencial armónico. Para observar este fenómeno introducimos los mismos parámetros que en el apartado anterior pero ahora, seleccionaremos *Number of symmetric solitons* = 2. Lo que calcularemos ahora es una solución con dos solitones impresos de forma simétrica. Primero ejecutamos el programa con una posición entre

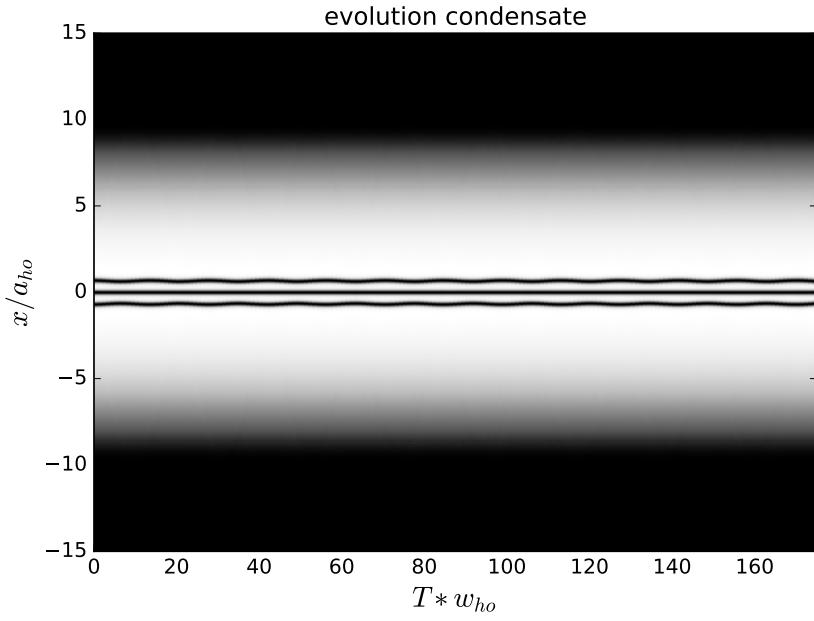


Figura 3: Estado ligado para 3 solitones oscuros.

ellos mayor a 2. Podemos comprobar en el apartado *MINUS* como el periodo es exactamente el mismo que con solo un solitón. Ha medida que hagamos los cálculos con una posición mas pequeña entre ellos, veremos como el periodo se va reduciendo. A una posición muy pequeña veremos un régimen totalmente repulsivo entre los solitones (recuperamos la interacción para un background homogneo). Podemos encontrar un estado ligado entre estos donde tendramos una solución estacionaria con los solitones, como la que vemos en la Fig. 3. Es interesante recoger diversos valores del periodo para diferentes posiciones de los solitones, obtendríamos una gráfica como la que se muestra en la Fig. 4. No podemos recuperar con esta simulación un fuerte resultado (podríamos pero el método sería extensamente largo), que es que la energía de interacción entre dos solitones es muy similar al potencial tipo partícula.

#### 5.4. Péndulo de Newton con solitones

Ahora que hemos estudiado diferentes propiedades de los solitones oscuros y la condensación de Bose-Einstein, vamos a proceder con un ejemplo bastante interesante donde mezclaremos diversos conceptos utilizados.

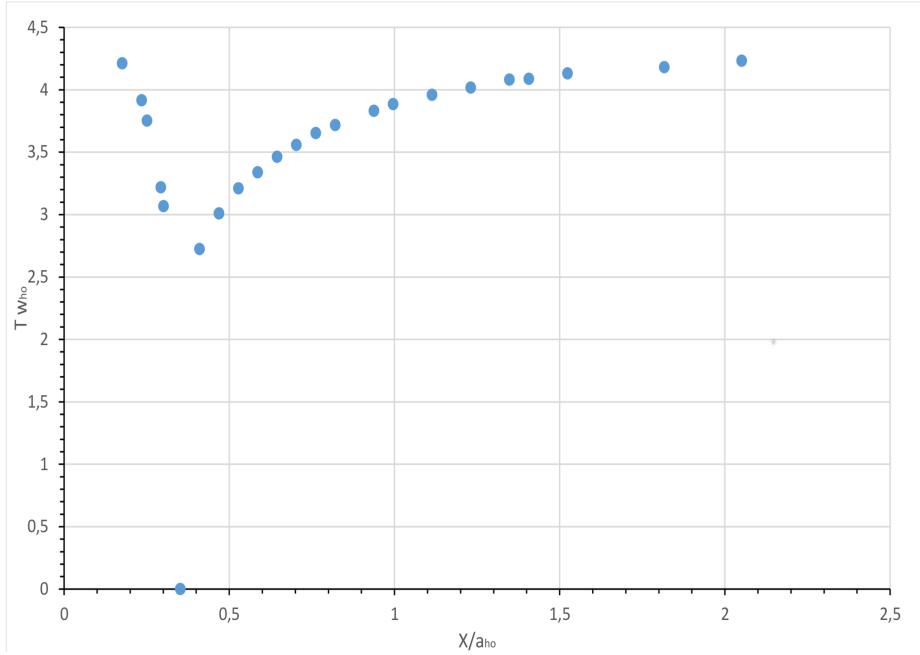


Figura 4: Evolución del periodo de dos solitones para diferentes posiciones simétricas de estos

Para inicializar este proceso debemos clicar en el módulo *Newton's cradle*, en *Computation control* se nos abrirán diferentes comandos a controlar. Básicamente controlaremos dos estados, uno será el estado central simétrico al que llamaremos la cadena de solitones; el otro será un estado que chocará con el anterior, que será el estado inicialmente en movimiento. En *number of solitons in motion* podemos controlar el número de solitones que queremos en el estado en movimiento (de 1 a 2). En *initial position of solitons in motion* controlamos la posición inicial de este mismo estado. Con *number of oscillations* controlamos el tiempo total que durará la simulación, básicamente está escalado con el periodo que tiene un único solitón. Finalmente con *number of solitons in chair* controlamos el estado central simétrico estacionario, podemos seleccionar de cuántos solitones está formado (de 1 a 3). Una vez estén todas las configuraciones seleccionadas iniciamos la simulación.

En este módulo nos interesaremos en la evolución del estado y en la gráfica *MINUS*, donde podemos obtener gráficas como la mostrada en la Fig. 5. Podemos observar un claro símil con un fenómeno del mundo clásico,

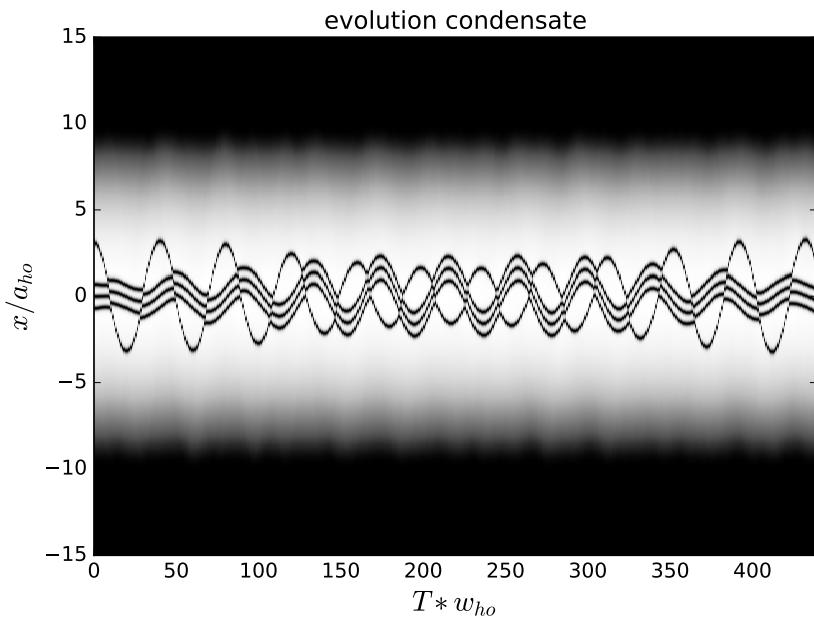


Figura 5: Evolución de un estado donde podemos observar el efecto del Péndulo de Newton

el péndulo de Newton. No olvidemos que lo que tenemos aquí es un condensado de Bose-Einstein y solitones oscuros. Sin embargo podemos ver que el comportamiento de estos es muy parecido al que tendrían unas bolas con un volumen y masa bajo un potencial.