



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"ENFOCAMIENTO Y PROPAGACIÓN NO LINEAL
DE HACES DE MATERIA"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA

MISAELE MIRÓN MONTERROSAS

DIRECTORES DE TESIS

DR. EMERSON LEAO SADURNÍ HERNÁNDEZ

No. de CVU: 995191

OCTUBRE DE 2022

Universidad Autónoma de Puebla
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”

Enfocamiento y propagación no lineal de haces de materia

Tesis presentada por

Misael Mirón Monterrosas

para obtener el grado de

**Maestría en Ciencias
(especialidad en Física)**

Dirigida por

Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández

Puebla, México

Octubre 2022

©2022 - Misael Mirón Monterrosas

Derechos Reservados



BUAP

“HUP, 50 años de enseñanza y salud”

Oficio No. IF-SACAD281/2022

Asunto: Oficio de modalidad de titulación.

MTRO. RICARDO VALDERRAMA VALDEZ

Director de Administración Escolar
Benemérita Universidad Autónoma de
PueblaPresente

El que suscribe, Director del Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas”, le informo que **MISAEEL MIRÓN MONTERROSAS**, matrícula: 220470449, presentará y defenderá su examen de grado de **MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)** en la **MODALIDAD DE PRESENTACION DE TESIS**, cuyo título es: **“ENFOCAMIENTO Y PROPAGACIÓN NO LINEAL DE HACES DE MATERIA”**, que se llevará a cabo el día **lunes 10 de octubre de 2022** a las **17:00 horas**. Se informa que dicho **EXAMEN DE GRADO SERÁ EN LÍNEA** debido a la emergencia sanitaria por el virus SARS CoV-2 a través de la plataforma de la VIEP. El Jurado Examinador estará integrado por:

Dr. Juan Francisco Rivas Silva	Presidente
Dr. Alfonso Rosado Sánchez.	Secretario
Dra. Zorayda Lazcano Ortiz.	Vocal
Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández.	Vocal

Sin otro asunto que el particular, aprovecho la oportunidad para reiterarle mi más alto reconocimiento.

A T E N T A M E N T E

“Pensar Bien, Para Vivir Mejor”

Puebla, Pue., a 23 de septiembre de 2022

FELIPE PÉREZ RODRÍGUEZ
DIRECTOR



DR*FPR/DRA*MECR/LAE*mhr

Instituto de Física
“Luis Rivera Terrazas”

Av. San Claudio esq. 18 Sur, Edif. IF1,
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel
Puebla, Pue. C.P. 72570
01 (222) 229 55 00 Ext. 5610, 5611, 2008

Agradecimientos

A mis papás Abundio e Irene Isabel, a mis hermanos Emanuel y Esmeralda, a todos mis sobrinos y cuñados, y el resto de mi familia que han creído en mí, ya que gracias a su apoyo incondicional y confianza he logrado cumplir mi objetivo de ser un maestro en ciencias con especialidad en física, y han sido mi motivo principal para continuar avanzando y creciendo en esta área de la ciencia, de la cual estoy muy maravillado. Muchos obstáculos hemos vivido juntos y a pesar de las adversidades seguimos de pie en la lucha y dedicación para alcanzar nuestros objetivos. Nada será igual sin ustedes.

A mi gran amigo Óscar, que gracias a sus consejos y apoyo, me ha ayudado a mantenerme siempre firme e ir por el buen camino.

A mis compañeros de cursos de la maestría, por el tiempo compartido al trabajar juntos en esta época tan difícil por la pandemia.

A todos mis amigos que conocí en la licenciatura y la maestría, en especial Luis Alberto, Vicente, Kevin, Gustavo, Alejandro, Salomon, Fausto e Ivan.

A mis profesores y el Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" que fueron los principales medios de mi formación.

A mi asesor Emerson Leao Sadurní Hernández por su paciencia, dedicación, disponibilidad y ayuda en la construcción de esta tesis.

A mi jurado por su disponibilidad y retroalimentación durante el desarrollo y presentación de este trabajo.

A Conacyt por su apoyo al otorgarme una Beca Nacional para solventar mis gastos económicos durante el desarrollo de esta maestría.

A todos los que están leyendo estas líneas.

Muchas gracias.

Dedicado a mis padres Abundio e Irene Isabel por todo su tiempo y apoyo incondicional durante mi formación como físico y en esta época tan difícil que nos dejó la pandemia.

Enfocamiento y propagación no lineal de haces de materia

Resumen

Este trabajo de tesis consiste en describir la evolución temporal del problema de Moshinsky con condiciones iniciales, para un condensado de Bose-Einstein en la aproximación de Gross-Pitaevskii (G-P), dependiente del tiempo en una dimensión espacial. Los resultados obtenidos son utilizados para resolver el problema con una dimensión más, tomando en cuenta la aproximación paraxial y el fenómeno de la difracción independiente del tiempo.

En el capítulo 1 presentamos el marco teórico de la descripción dinámica de un condensado en la teoría de campo medio mediante la ecuación de G-P y caracterizada por la constante de interacción binaria. Planteamos los problemas en una dimensión a resolver, correspondientes al caso de un obturador y de una rendija como condiciones iniciales para el fenómeno de la difracción.

En el capítulo 2 establecemos metodologías que permiten obtener soluciones analíticas a tiempos cortos y largos, con constante de interacción pequeña en cada problema planteado. En ambas situaciones tomamos en cuenta la solución de los problemas en el caso lineal (ecuación de Schrödinger con potencial externo nulo) y su comportamiento asociado con el fenómeno difractivo, para obtener soluciones correspondientes a los condensados, incorporando estas propiedades mediante una solución en serie y asociada con la constante de interacción del sistema.

En el capítulo 3 confirmamos que las soluciones analíticas obtenidas para tiempos y constante de interacción pequeños, encontradas en el capítulo 2, sean correctas, mediante la implementación de un método numérico asociado a diferencias finitas y una cuadratura tipo Runge-Kutta vectorial. Además, enunciarnos algunas observaciones para acoplamientos fuertes.

En el capítulo 4 usamos algunas soluciones encontradas en el capítulo 2, para describir un haz de bosones dispersados por una rendija en el caso estacionario y en dos dimensiones para estudiar el fenómeno de enfocamiento de estas ondas.

Finalmente, resaltamos algunas propiedades importantes debido al uso de condensados y que no están presentes en los problemas lineales correspondientes. Además, damos algunas alternativas de aplicación de la nueva técnica de posicionamiento de materia presentada al final de este trabajo.

Nonlinear focusing and propagation of matter beams

Abstract

This thesis work consists in describing the time evolution of the Moshinsky problem with initial conditions for a Bose-Einstein condensate in the time-dependent Gross-Pitaevskii (G-P) approximation in one spatial dimension. The obtained solutions are also employed in the description of the stationary two-dimensional problem of diffraction by means of a paraxial approximation.

In chapter 1 we present the theoretical framework for the dynamical description of a condensate in mean-field theory including a binary interaction constant, and arrive at the G-P equation. We pose the one-dimensional problems to be solved corresponding to the case of a shutter and a slit as initial conditions for the diffraction phenomenon.

In chapter 2 we establish a method that allows to obtain analytical solutions at short and long times with small interaction constant in each problem. In both situations we take into account the solution of the linear case (Schrödinger equation with null external potential) and its behavior associated with diffractive effects to obtain density distributions of the condensates incorporating non-linearities by means of a series solution. The expansion variable is the interaction constant of the system.

In chapter 3 we confirm that the analytical solutions obtained for small times and interaction constant found in chapter 2 are correct, by implementing a numerical method associated to finite differences and a vector Runge-Kutta quadrature. In addition, we state some observations for strong couplings.

In Chapter 4 we use some solutions found in Chapter 2 to describe a beam of bosons scattered by a slit in the stationary case and in two dimensions to study the focusing phenomenon of these waves.

Finally, we highlight some important properties due to the use of condensates and which are not present in the corresponding linear problems. In addition, we give some alternative applications of the new matter positioning technique presented at the end of this paper.

Participación en eventos

- Enfocamiento y propagación no lineal de haces de materia, Mirón Monterrosas Misael, Sadurní Hernández Emerson, Simposio Estudiantil de Ciencia Física del IFUAP, Puebla, México (2022).
- Enfocamiento y propagación no lineal de haces de materia, Mirón Monterrosas Misael, Sadurní Hernández Emerson, LXV Congreso Nacional de Física, Zacatecas, México (2022).

Contenido

1	Antecedentes y planteamiento del problema	3
1.1	Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii	3
1.2	Problemas dinámicos a resolver	8
2	Solución analítica de la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo	12
2.1	Obturador como condición inicial y potencial externo nulo	12
2.1.1	Solución general	12
2.1.2	Solución para tiempos cortos	20
2.1.3	Solución para tiempos largos y estabilidad de Bogoliubov	23
2.2	Rendija de difracción y potencial externo nulo	31
2.2.1	Solución en el régimen de tiempos cortos.	32
2.2.2	Renormalización de la función de onda a tiempos cortos	38
2.2.3	Corrección del tiempo de enfocamiento para la onda a tiempos cortos	38
2.2.4	Solución en el régimen de tiempos largos	42
3	Solución numérica para la ecuación diferencial de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo y presentación de resultados	46
3.1	Solución numérica para la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo	46
3.1.1	Condiciones para el problema del obturador	49
3.1.2	Condiciones para el problema de la rendija de difracción	50
3.1.3	Observaciones del método numérico	51
3.2	Resultados obtenidos con el método analítico y numérico para tiempos cortos	52
3.2.1	Obturador	52
3.2.2	Rendija de difracción	53
3.3	Resultados numéricos para acoplamientos fuertes y su consecuencia en el fenómeno de enfocamiento	58
4	Preparación de un condensado y problema en dos dimensiones espaciales	61
4.1	Creación de un condensado de Bose-Einstein	61
4.2	Preparación de la condición de una rendija	64
4.3	Difracción en dos dimensiones espaciales	67
5	Conclusiones	73

Introducción

En 1924 el físico indio Satyendra Nath Bose derivó la ley de Planck para la radiación de cuerpo negro considerada como un gas de fotones indistinguibles que pueden ocupar el mismo estado de energía [1]. Einstein analizó este enfoque y lo generalizó para estudiar gases de partículas materiales desde la mecánica cuántica a partir de la propiedad ondulatoria y la hipótesis de de Broglie para éstas. Entre los años de 1924 y 1925 ambos físicos publicaron dos artículos en los que se aplicó el marco teórico de Bose a un gas ideal y se desarrolló lo que hasta hoy se conoce como estadística de Bose-Einstein. La condensación de Bose-Einstein es un fenómeno en el cual un número muy grande de partículas (bosones con espín entero) ocupan un sólo estado cuántico, el fundamental con energía $\epsilon = 0$ y a temperaturas pequeñas [2]. La condensación es una transición de fase a temperatura pequeña pero finita.

La primera evidencia experimental de la existencia de los condensados fue en 1938 cuando Fritz London encontró y publicó que el helio líquido II a muy bajas temperaturas exhibía propiedades muy cercanas a las de un condensado de Bose [3]. Sin embargo, fue hasta 1976 y años subsecuentes en los que grupos de MIT, Amsterdam, Columbia Británica, Cornell, Harvard, Moscú y Turquía trataron de generar condensados experimentalmente usando hidrógeno con espín polarizado [4] pero tenían problemas por la combinación de átomos [5]. Durante las décadas de los 80's y 90's surgieron nuevas técnicas de enfriamiento y atrapamiento de haces atómicos usando láseres, entre éstas podemos destacar las realizadas por W. D. Phillips, A. Ashkin y otros [6]. Esta serie de experimentos fueron los precursores para la realización de otros con átomos alcalinos para producir condensados de Bose a temperaturas del orden de microkelvins. En 1995 Anderson, Ensher y Matthews experimentaron con vapor de rubidio. En el mismo año Davis trabajó con sodio y Bradley con litio. En general, ambos utilizaron trampas magnéticas, enfriamiento con láseres y la

evaporación para disminuir la temperatura [7]. A inicios de este milenio también se generaron más aportes tanto teóricos como experimentales, de los cuales podemos destacar los debidos a Pitaevskii y Stringari (2003), Leggett (2006), y Pethick y Smith (2008) [2]. En tiempos recientes se ha demostrado que los condensados de Bose-Einstein proveen el estándar de precisión en la confirmación experimental del principio de equivalencia. Esto hace que los haces de materia sean una aplicación atractiva en la física fundamental y la metrología [8]. La primera posibilidad incide de manera importante en las hipótesis que sostienen a la relatividad general, mientras que la segunda opción se encarga de medir la constante de gravitación universal con la mayor precisión posible [9, 10]. Existen muchos proyectos en este orden de ideas como el llamado BECCAL financiado por NASA-CLR [10] y otro llamado QUANTUS financiado por ZARM [11].

Este trabajo se enfoca en comprender desde el punto de vista teórico cómo se puede controlar la propagación de un condensado usando difracción y fenómenos de interferencia en ecuaciones no lineales. En dicho marco teórico, otros enfoques como lo son el fenómeno de la difracción en el tiempo de haces de materia pasando por un borde [18] o el proceso difractivo de enfocamiento de un haz de partículas usando una rejilla [12, 13] han evidenciado el fenómeno ondulatorio de las partículas tomando como base la ecuación de Schrödinger sin potencial y mostrando resultados similares al comportamiento de la luz al difractarse por un borde o una rendija. Tradicionalmente se había considerado la difracción cuántica para haces de neutrones térmicos, ya que a pesar de ser fermiones, estos se podían enviar como un haz cuasimonocromático a cristales de silicio que los desviaban [14]. Sin embargo, se encontró que la coherencia del haz tiene mayor pureza en el caso de condensados de Bose-Einstein, ya que debido a su estadística podemos tratar con haces con alta densidad y los términos de interferencia y difracción son más notables. El tratamiento de la difracción de estos haces ha llevado a nuestro grupo de trabajo a comparar efectos de la mecánica cuántica con aquellos derivados de una ecuación no lineal. Planeamos fijar las bases para una nueva propuesta de posicionamiento de materia usando bosones en el campo de la litografía cuántica [15] para la creación de nanoestructuras, con un posible impacto en desarrollos tecnológicos. En vista de que la difracción de haces de materia tiene muchas aplicaciones interesantes se considera de importancia enfocarse sólo en este problema.

Capítulo 1

Antecedentes y planteamiento del problema

En este capítulo nos enfocamos en introducir al lector en la descripción dinámica de un condensado de Bose-Einstein diluido y a bajas temperaturas mediante la ecuación de G-P. Es conveniente recordar cómo se deduce la ecuación de G-P, para tener una idea más clara de cómo se aplica la descripción efectiva en problemas de muchos cuerpos con estadística de Bose y con ayuda del principio de Hamilton, aplicado a una acción basada en una densidad Lagrangiana, que nos permita obtener la ecuación de Schrödinger para este tipo de problemas. Además, como problemas dinámicos con evolución temporal, es importante presentar las condiciones iniciales de los problemas más importantes que se abordarán.

1.1 Deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii

La deducción de la ecuación de Gross-Pitaevskii (G-P) comúnmente se hace a partir del marco teórico de campo medio. Un enfoque es construir el Hamiltoniano para un gas diluido en la segunda cuantización formulada por Bogoliubov (1947) [5]. Sin embargo, en este trabajo se deduce la misma ecuación desde de un enfoque variacional como en la mecánica clásica de medios continuos.

Para esto consideramos un gas no tan diluido de N bosones a temperaturas cercanas del cero absoluto. La condición de no ser tan diluido se debe a que la estadística del sistema es importante para las propiedades de simetrización e intercambio en la función de onda

total. Así, el potencial considerado es de contacto y caracterizado por la energía de campo medio. Esta energía corresponde a la energía de interacción binaria entre partículas y depende de la longitud de dispersión de ondas s .

El operador hamiltoniano del sistema es construido considerando los términos de energía cinética y energía potencial externa de cada partícula, además del enriquecimiento con el término de interacción, la forma de este operador es

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{x}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N U_0 \delta^3(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \quad (1.1)$$

donde $U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ es la energía de campo medio, a es la longitud de dispersión de ondas s y m es la masa de cada bosón.

Dado que el sistema está a temperaturas cercanas del cero absoluto, cada bosón se encuentra en el mismo estado fundamental de energía, el de energía más baja, y la función de onda correspondiente a este estado, es común para la descripción dinámica de cada partícula. Por lo tanto, consideramos la función de onda del condensado como el producto simetrizado de funciones de este estado, es decir, de la forma

$$\Psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t) = \prod_{i=1}^N \psi(\vec{x}_i, t). \quad (1.2)$$

La funcional de energía es

$$E[\Psi, \Psi^*] = \int \Psi \mathcal{H} \Psi^* \prod_{i=1}^N d^3 x_i. \quad (1.3)$$

En esta última expresión es importante resaltar la combinación de elementos o fundamentos tanto clásicos como cuánticos.

Tomando en cuenta este último resultado y el ejercicio propuesto en [16], consideramos la acción

$$I = \int \mathcal{L}[\Psi, \Psi^*] \prod_{i=1}^N d^3 x_i dt \quad (1.4)$$

con la densidad Lagrangiana

$$\mathcal{L}[\Psi, \Psi^*] = \frac{1}{2} [\Psi^* \mathcal{H} \Psi + \Psi \mathcal{H} \Psi^*] + \frac{\hbar}{2i} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right]. \quad (1.5)$$

Sustituimos las ecuaciones (1.2) y (1.5) en (1.4) y desarrollamos las derivadas parciales respecto al tiempo de un producto de funciones, el resultado que obtenemos es

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \int \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N |\psi(\vec{x}_i, t)|^2 \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N d^3 x_i \left[\int \psi^*(\vec{x}_j, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V(\vec{x}_j) \right) \psi(\vec{x}_j, t) d^3 x_j \right. \\
&\quad \left. + \int \psi(\vec{x}_j, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V(\vec{x}_j) \right) \psi^*(\vec{x}_j, t) d^3 x_j \right] dt \\
&\quad + \frac{1}{2} U_0 \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \int \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i \\ k \neq j}}^N |\psi(\vec{x}_k, t)|^2 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i \\ k \neq j}}^N d^3 x_k \int d^3 x_i d^3 x_j |\psi(\vec{x}_i, t)|^2 |\psi(\vec{x}_j, t)|^2 \delta^3(\vec{x}_i - \vec{x}_j) dt \\
&\quad + \frac{\hbar}{2i} \sum_{j=1}^N \left[\int \prod_{l=1}^N \psi^*(\vec{x}_l, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}_j, t)}{\partial t} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \psi(\vec{x}_k, t) \prod_{i=1}^N d^3 x_i \right. \\
&\quad \left. - \int \prod_{l=1}^N \psi(\vec{x}_l, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{x}_j, t)}{\partial t} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \psi^*(\vec{x}_k, t) \prod_{i=1}^N d^3 x_i \right] dt.
\end{aligned} \tag{1.6}$$

La función de onda de cada cada bosón, ψ , está normalizada de tal manera que la expresión anterior se puede reducir a integrales idénticas en forma de producto, lo cual permite escribirla como una suma de N integrales iguales de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
\frac{I}{N^{N-1}} &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[\int \psi^*(\vec{x}_j, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V(\vec{x}_j) \right) \psi(\vec{x}_j, t) d^3 x_j \right. \\
&\quad \left. + \int \psi(\vec{x}_j, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V(\vec{x}_j) \right) \psi^*(\vec{x}_j, t) d^3 x_j \right] dt \\
&\quad + \frac{1}{2} U_0 N \sum_{j=1}^N \int |\psi(\vec{x}_j, t)|^4 d^3 x_j dt \\
&\quad + \frac{\hbar}{2i} \sum_{j=1}^N \left[\int \psi^*(\vec{x}_j, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}_j, t)}{\partial t} d^3 x_j - \int \psi(\vec{x}_j, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{x}_j, t)}{\partial t} d^3 x_j \right] dt,
\end{aligned} \tag{1.7}$$

y usando variables mudas, esto se puede escribir,

$$\begin{aligned}
\frac{I}{N^{N-1}} &= \frac{1}{2} N \int \left[\psi^*(\vec{x}, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) + \psi(\vec{x}, t) \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right) \psi^*(\vec{x}, t) \right. \\
&\quad \left. + U_0 N |\psi(\vec{x}, t)|^4 + \frac{\hbar}{i} \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar}{i} \psi(\vec{x}, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{x}, t)}{\partial t} \right] d^3 x dt.
\end{aligned} \tag{1.8}$$

Recordemos que las funciones de densidad en el condensado suelen estar normalizadas al número total de partículas, de tal manera que la integral de la densidad es igual a

N . Por lo tanto, cada bosón tiene una función de onda que satisface $\psi(\vec{x}, t) = \sqrt{N}\phi(\vec{x}, t) = \sqrt{N}\phi$ y $\psi^*(\vec{x}, t) = \sqrt{N}\phi^*(\vec{x}, t) = \sqrt{N}\phi^*$, de tal manera que

$$\frac{I}{N^{N-1}} = \frac{1}{2} \int \left[\phi^* \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \phi + \phi \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \phi^* + U_0 |\phi|^4 + \frac{\hbar}{i} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\hbar}{i} \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right] d^3 x dt. \quad (1.9)$$

De acuerdo a las propiedades $\phi^* \nabla^2 \phi = \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi) - |\nabla \phi|^2$, y $\phi \nabla^2 \phi^* = \nabla \cdot (\phi \nabla \phi^*) - |\nabla \phi|^2$ y el teorema de la divergencia, se tiene

$$\int \phi^* \nabla^2 \phi d^3 x dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_S \hat{n} \cdot \phi^* \nabla \phi d\text{ad}t - \int |\nabla \phi|^2 d^3 x dt, \quad (1.10)$$

$$\int \phi \nabla^2 \phi^* d^3 x dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_S \hat{n} \cdot \phi \nabla \phi^* d\text{ad}t - \int |\nabla \phi|^2 d^3 x dt. \quad (1.11)$$

Tomando en cuenta que el flujo total, hacia dentro y fuera de la superficie S , es cero, entonces las integrales de superficie son cero y

$$\int \phi^* \nabla^2 \phi d^3 x dt = - \int |\nabla \phi|^2 d^3 x dt, \quad (1.12)$$

$$\int \phi \nabla^2 \phi^* d^3 x dt = - \int |\nabla \phi|^2 d^3 x dt. \quad (1.13)$$

Así

$$\frac{I}{N^{N-1}} = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 + V |\phi|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\phi|^4 + \frac{\hbar}{2i} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\hbar}{2i} \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right] d^3 x dt. \quad (1.14)$$

Es importante recalcar que las integrales son realizadas en un espacio-tiempo no relativista, donde cada punto en este espacio es descrito por el vector de evento $\vec{X} = (\vec{x}, t)$, el cual contiene los parámetros de evolución, y corresponden al eje horizontal de la figura 1.1. Las variables ϕ y ϕ^* son los grados de libertad del campo, $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ y $\frac{\partial \phi^*}{\partial t}$ son análogos a las velocidades generalizadas, y en conjunto corresponden a el eje vertical de la misma figura. En (V_1, t_1) y (V_2, t_2) los campos están fijos y es donde se aplica el principio de Hamilton para la trayectoria más corta entre estos.

Nota: Cabe mencionar que la densidad de bosones en el estado fundamental es $n(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = N |\phi(\vec{x}, t)|^2$, de tal manera que $\int n(\vec{x}, t) d^3 x = N$.

De acuerdo al principio de Hamilton, la evolución del sistema desde un hipervolumen fijo $V_1 t_1$ a otro hipervolumen fijo $V_2 t_2$, es tal que la variación de la integral de camino de la ecuación (1.14) es cero [16, 17]. Entonces,

$$0 = \delta \left(\frac{I}{N^{N-1}} \right) = \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \delta \phi^* \cdot \nabla \phi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \delta \phi \cdot \nabla \phi^* + V \phi \delta \phi^* + V \phi^* \delta \phi + U_0 |\phi|^2 \phi \delta \phi^* + U_0 |\phi|^2 \phi^* \delta \phi - \frac{\hbar}{2} i \delta \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\hbar}{2} i \phi^* \frac{\partial \delta \phi}{\partial t} + \frac{\hbar}{2} i \delta \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} + \frac{\hbar}{2} i \phi \frac{\partial \delta \phi^*}{\partial t} \right] d^3 x dt. \quad (1.15)$$

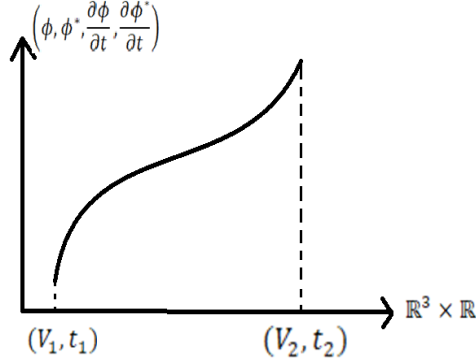


Figura 1.1: Principio de mínima acción. Se muestran los puntos iniciales y finales como fronteras de un espacio cuadridimensional, donde el campo está especificado, y una posible trayectoria que los une, en el eje vertical se muestran los campos y sus correspondientes velocidades.

Tomando en cuenta las propiedades $\nabla \delta \phi^* \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\delta \phi^* \nabla \phi) - \delta \phi^* \nabla^2 \phi$ y $\phi \frac{\partial \delta \phi^*}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\phi \delta \phi^*) - \delta \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t}$, junto con el teorema de la divergencia e integración por partes, tenemos

$$\int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \nabla \delta \phi^* \cdot \nabla \phi d^3 x dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_{S_1}^{S_2} \hat{n} \cdot (\delta \phi^* \nabla \phi) da dt - \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \delta \phi^* \nabla^2 \phi d^3 x dt, \quad (1.16)$$

$$\int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \phi \frac{\partial \delta \phi^*}{\partial t} d^3 x dt = \int_{V_1}^{V_2} \phi \delta \phi^* |_{t_1}^{t_2} d^3 x - \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \delta \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3 x dt. \quad (1.17)$$

Además, ϕ y ϕ^* están fijos en los límites de integración, es decir, $\delta \phi|_{S_1, S_2} = 0 = \delta \phi^*|_{S_1, S_2}$ y $\delta \phi|_{t_1, t_2} = 0 = \delta \phi^*|_{t_1, t_2}$. Entonces,

$$\int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \nabla \delta \phi^* \cdot \nabla \phi d^3 x dt = - \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \delta \phi^* \nabla^2 \phi d^3 x dt, \quad (1.18)$$

$$\int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \phi \frac{\partial \delta \phi^*}{\partial t} d^3 x dt = - \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \delta \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3 x dt. \quad (1.19)$$

Resultados similares se pueden obtener si intercambiamos $\phi \rightarrow \phi^*$ y $\phi^* \rightarrow \phi$, para llegar a

$$0 = \frac{1}{2} \int_{(V_1, t_1)}^{(V_2, t_2)} \left[\left\{ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \phi + 2V\phi + 2U_0|\phi|^2\phi - 2i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\} \delta \phi^* + \left\{ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 \phi^* + 2V\phi^* + 2U_0|\phi|^2\phi^* - 2i\hbar \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right\} \delta \phi \right] d^3 x dt. \quad (1.20)$$

Dado que las variaciones $\delta\phi \neq 0$ y $\delta\phi^* \neq 0$, entonces la igualdad anterior se cumple para cualquier región espacio-tiempo elegida para realizar la integración, si

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{x}) + U_0|\phi(\vec{x},t)|^2 \right\} \phi(\vec{x},t) = i\hbar\frac{\partial\phi(\vec{x},t)}{\partial t}. \quad (1.21)$$

Esta es la ecuación bien conocida de Gross-Pitaevskii para un condensado de bosones a baja temperatura y densidad. Las hipótesis más importantes que se toman en cuenta bajo estas condiciones del sistema para deducir esta última ecuación son: i) La interacción binaria átomo-átomo es la más importante en la energía potencial y ii) todos los bosones están en el estado fundamental, por lo tanto, se aplica la simetrización y separabilidad en productos de funciones de onda de cada bosón en dicho estado, con el fin de crear una función de onda total del sistema, similar al caso de un gas ideal, aunque nuestro sistema no sea idéntico a éste.

1.2 Problemas dinámicos a resolver

El problema general es resuelto considerando las condiciones iniciales para determinar la evolución en el espacio y el tiempo. En este trabajo nos enfocaremos en dos tipos de condiciones iniciales importantes para nuestro estudio.

a) Borde semi infinito u obturador

La propagación de un haz de bosones en contacto con un borde semi infinito como medio dispersor justo antes del proceso de difracción lo esquematizamos en las Figuras 1.2 y 1.3. En la primera observamos el perfil de la función de onda plana y su propagación, correspondiente al haz dirigido hacia el obturador, éste último es creado en $t = 0$ con la remoción de una parte de la barrera infinita. En la segunda tenemos una simplificación matemática del problema anterior, la cual corresponde a la propagación de una señal de bosones encendida en cierto instante y mantiene las mismas características iniciales hasta llegar al borde.

La expresión matemática, correspondiente a la condición inicial general del obturador, es

$$\phi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\Theta(-x). \quad (1.22)$$

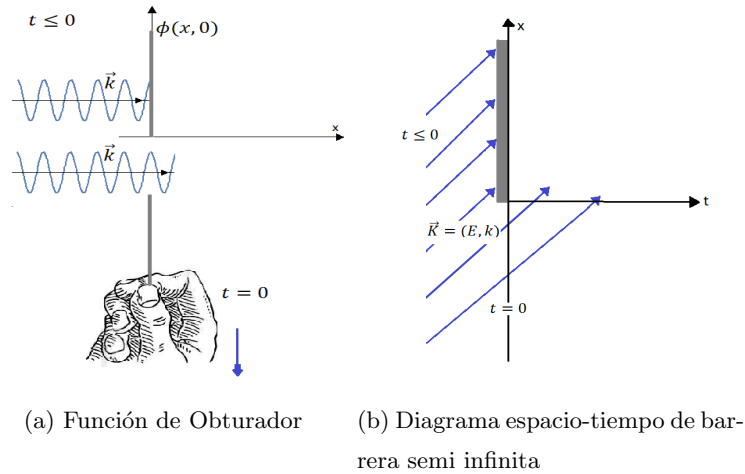


Figura 1.2: Barrera semi infinita y onda plana. En las figuras (a) y (b) se muestra la acción del obturador, es decir, quitar la mitad de una barrera infinita en $t = 0$. En (a) se muestra el perfil de la onda y en (b) se encuentra la dirección de propagación de la onda. Para tiempos anteriores al análisis difractivo, $t \leq 0$, la onda es una onda plana.

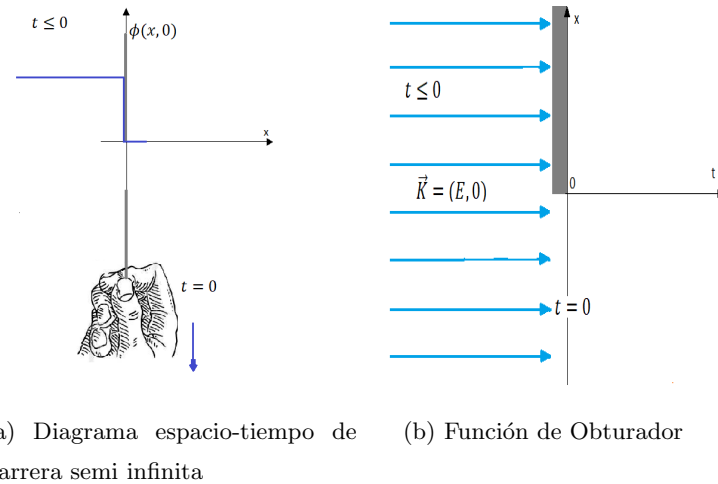


Figura 1.3: Barrera semi infinita, caso simplificado. Similar al caso anterior, sin embargo, para tiempos anteriores al análisis del fenómeno difractivo, $t \leq 0$, la onda es una función Heaviside. En (a) mostramos el perfil de la onda, mientras que en (b) se encuentra la propagación en el tiempo.

b) Difracción por una rendija

La propagación de un haz de partículas en contacto con una rendija como medio dispersor durante el fenómeno difractivo se muestra en la Figura 1.4, la cual corresponde a un problema lineal con constante de campo medio nula. En el instante inicial que el haz tiene contacto con la rendija, la configuración del sistema es una haz cuya densidad de probabilidad sea un paquete cuadrado. Conforme el tiempo avanza las discontinuidades debido a las paredes de la rendija originan el fenómeno de la difracción haciendo que la densidad cambie de forma hasta conseguir el enfocamiento. En el caso del uso de bosones esperamos comportamientos similares con efectos de nuevos parámetros, como es la constante de acoplamiento.

La expresión matemática correspondiente a esta condición inicial es

$$\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \left[1 - \Theta \left(-x - \frac{L}{2} \right) - \Theta \left(x - \frac{L}{2} \right) \right]. \quad (1.23)$$

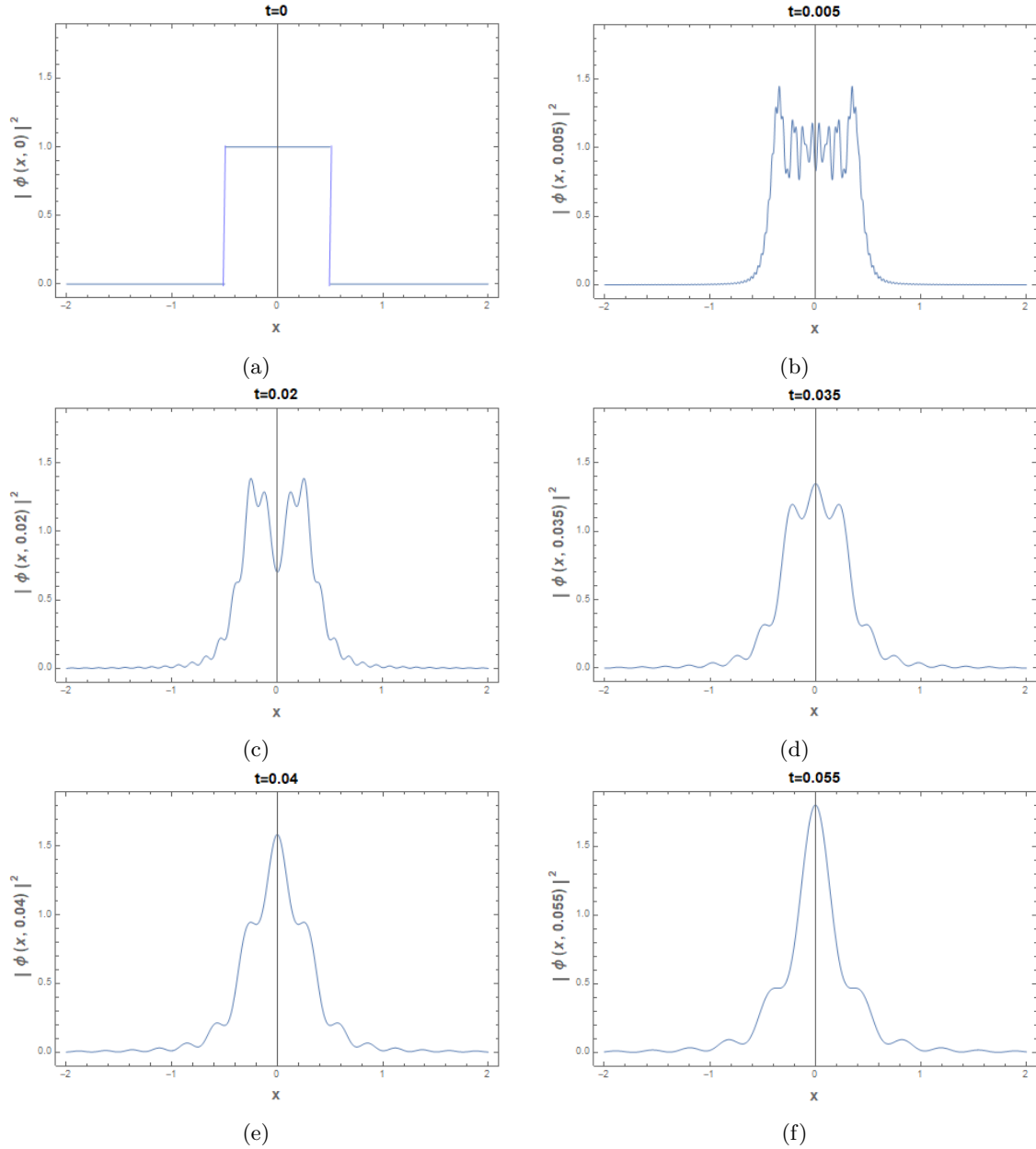


Figura 1.4: Difracción por una rendija. Perfil de densidad para la función de onda, que resuelve el caso lineal, a tiempo (a) $t = 0$ s, (b) $t = 0.005$ s, (c) $t = 0.02$ s, (d) $t = 0.035$ s, (e) $t = 0.04$ s y (f) $t = 0.055$ s. Esperamos comportamientos parecidos, cualitativamente, para la ecuación de G-P, donde el nuevo parámetro influye en la forma del gráfico.

Capítulo 2

Solución analítica de la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo

En este capítulo presentamos la solución analítica general de la ecuación diferencial de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo en una dimensión espacial con un potencial externo nulo para la condición inicial de un obturador. De acuerdo a la complejidad de la metodología e intereses específicos, abordamos las soluciones a tiempos cortos y largos.

Por otro lado, consideramos el problema con la condición inicial de una rendija de difracción. Primero abordamos el caso de tiempos cortos. Luego el caso de tiempos largos. Usamos algunos resultados y herramientas del primer problema.

2.1 Obturador como condición inicial y potencial externo nulo

2.1.1 Solución general

En el artículo [18] Moshinsky encontró la solución para la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_0(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_0(x, t), \quad (2.1)$$

con la condición inicial $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \Theta(-x)$. La expresión de esta solución es

$$\phi_0(x, t) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{im}{2\hbar t} \left[x^2 - \left(x - \frac{\hbar kt}{m} \right)^2 \right]} \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{\hbar kt}{m} \right) \right] \quad (2.2)$$

con $\operatorname{erfc}[y] = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_y^\infty e^{-u^2} du$.

De estas últimas expresiones se deduce que para la condición inicial $\psi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x)$ la solución de la ecuación diferencial (2.1) es

$$\phi_0(x, t) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{x}{\sqrt{t}} \right]. \quad (2.3)$$

Las expresiones (2.2) y (2.3) exhiben la naturaleza difractiva que se explicará más adelante. A estas alturas es importante tomar en cuenta la siguiente proposición.

Proposición 1. *Sea $\phi(x, t)$ solución de la ecuación diferencial de G-P en 1D con condición inicial $\phi(x, 0)$. Entonces para la condición $e^{ikx} \phi(x, 0)$ le corresponde la solución $e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \phi(x - \frac{\hbar k}{m} t, t)$ de esta misma ecuación diferencial.*

Demostración. Consideremos los cambios de variable: $t' = t$, $x' = x + vt$, de tal manera que $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'}$, $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2}$ y $\frac{\partial}{\partial t} = v \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial t'}$.

En términos de estas nuevas variables, la ecuación (1.21) en 1D es convertida a la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - i\hbar \left(v \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\partial}{\partial t'} \right) + V + U_0 \right] e^{i(kx' - \epsilon t')} \phi(x' - vt', t')^2 \times \quad (2.4)$$

$$\times \left[e^{-i(kx' - \epsilon t')} e^{i(kx' - \epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right] = 0,$$

donde ϵ y v son constantes a determinar. Es importante tomar en cuenta que la norma de la función de onda, en la ecuación diferencial G-P, permite ver que en este caso tenemos términos de ondas viajeras involucrados, de tal manera que podemos considerar sin lugar a duda el ansatz anterior.

De la propiedad

$$\left(\frac{d}{dy} + g(y) \right)^n f(y) = e^{-\int g(y) dy} \frac{d^n}{dy^n} \left\{ e^{\int g(y) dy} f(y) \right\}, \quad (2.5)$$

obtenemos

$$\begin{aligned}
e^{-i(kx'-\epsilon t')} \left(\frac{\partial}{\partial x'} - ik \right) \phi(x' - vt', t') &= \frac{\partial}{\partial x'} \left\{ e^{-i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right\}, \\
e^{-i(kx'-\epsilon t')} \left(\frac{\partial}{\partial x'} - ik \right)^2 \phi(x' - vt', t') &= \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \left\{ e^{-i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right\}, \\
e^{-i(kx'-\epsilon t')} \left(\frac{\partial}{\partial t'} + i\epsilon \right) \phi(x' - vt', t') &= \frac{\partial}{\partial t'} \left\{ e^{-i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right\}.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Entonces, la ecuación (2.4) es convertida en

$$\begin{aligned}
e^{-i(kx'-\epsilon t')} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x'} - ik \right)^2 - i\hbar v \left(\frac{\partial}{\partial x'} - ik \right) - i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t'} + i\epsilon \right) \right. \\
\left. + V + U_0 |e^{i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t')|^2 \right] \left[e^{i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right] = 0,
\end{aligned} \tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}
e^{-i(kx'-\epsilon t')} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{i\hbar^2 k}{m} \frac{\partial}{\partial x'} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} - i\hbar v \frac{\partial}{\partial x'} - \hbar v k - i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} + \hbar\epsilon \right. \\
\left. + V + U_0 |e^{i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t')|^2 \right] \left[e^{i(kx'-\epsilon t')} \phi(x' - vt', t') \right] = 0.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Esta última ecuación toma la forma de G-P en una dimensión para las variables x' y t' si $v = \frac{\hbar k}{m}$ y $\epsilon = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Por lo tanto, $e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \phi(x - \frac{\hbar k}{m} t, t)$ es solución de la ecuación diferencial G-P con la condición inicial $e^{ikx} \phi(x, 0)$.

Cabe resaltar que la norma de la función es la misma para ambos casos, es decir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \phi \left(x - \frac{\hbar k}{m} t, t \right) \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x', t)|^2 dx'. \tag{2.9}$$

□

Note que esta proposición en particular se cumple cuando $g = 0$, es decir, la ecuación de Schrödinger en una dimensión con potencial externo nulo.

Entonces, sin pérdida de generalidad, es pertinente considerar la condición inicial $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x)$, cuya solución para la ecuación (2.1) tiene la forma siguiente

$$\begin{aligned}
\phi_0(x, t) &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta \right] = \phi_0(\eta), \\
\eta &= \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \frac{x}{\sqrt{t}}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Motivados por este resultado, consideramos la ecuación diferencial de G-P en 1D

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 |\phi(x, t)|^2 \right\} \phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t}. \quad (2.11)$$

Buscamos soluciones que contengan los efectos difractivos. Es importante recalcar que el efecto difractivo es equivalente a un comportamiento no analítico de la función en $t = 0$. Por lo que aislamos el comportamiento no analítico en la variable η y procedemos a realizar una perturbación para todo tiempo o un desarrollo en serie para obtener una función analítica en la nueva variable τ . Esto también vale para procesos difractivos con oscilaciones violentas a través de la variable η . Consideramos entonces el siguiente *ansatz*:

$$\phi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \tau^n f_n(\eta) = \phi(\eta, \tau), \quad (2.12)$$

con $\tau = t$. En este desarrollo tomamos en cuenta que $f_0(\eta) = \phi_0(\eta)$ cuando $g = 0$ como la primera contribución con efecto difractivo y que este mismo efecto esté presente en las funciones $f_n(\eta)$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Estas últimas funciones complejas serán determinadas.

De acuerdo a las definiciones de τ y η y el uso de la regla de la cadena podemos considerar que $\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{m}{\hbar\tau} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}$ y $\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\eta}{2\tau} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial \tau}$. Entonces, la ecuación (2.11) se puede escribir como

$$\frac{\partial^2 \phi(\eta, \tau)}{\partial \eta^2} - i\eta \frac{\partial \phi(\eta, \tau)}{\partial \eta} + 2i\tau \frac{\partial \phi(\eta, \tau)}{\partial \tau} = \frac{2U_0\tau}{\hbar} |\phi(\eta, \tau)|^2 \phi(\eta, \tau). \quad (2.13)$$

Sustituyendo la función (2.12) en la ecuación (2.13), reduciendo términos y reescribiendo una sumatoria se tiene,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \tau^n \left[\frac{d^2 f_n(\eta)}{d\eta^2} - i\eta \frac{df_n(\eta)}{d\eta} + 2in f_n(\eta) \right] = \frac{2U_0}{\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \tau^n \sum_{\substack{k+l+1 \leq n \\ k=0,1,\dots \\ l=0,1,\dots}} f_{n-k-l-1}(\eta) f_k^*(\eta) f_l(\eta). \quad (2.14)$$

Como el conjunto de elementos $\{\tau^m\}_{m=0}^{\infty}$ es linealmente independiente, entonces igualamos los coeficientes de las mismas potencias de τ .

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f_0(\eta)}{d\eta^2} - i\eta \frac{df_0(\eta)}{d\eta} &= 0, \\ n \in \mathbb{N}, \frac{d^2 f_n(\eta)}{d\eta^2} - i\eta \frac{df_n(\eta)}{d\eta} + 2in f_n(\eta) &= \frac{2U_0}{\hbar} \sum_{\substack{k+l+1 \leq n \\ k=0,1,\dots \\ l=0,1,\dots}} f_{n-k-l-1}(\eta) f_k^*(\eta) f_l(\eta). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Observamos que para determinar la expresión de $f_n(\eta)$ necesitamos las formas explícitas de $f_{n-1}(\eta)$, $f_{n-2}(\eta)$, $f_{n-3}(\eta)$, ..., para $n \in \mathbb{N}$.

Cada una de las ecuaciones diferenciales de (2.15) se pueden resolver con ayuda de una función de Green que satisface la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 G_n(\eta, \eta')}{d\eta^2} - i\eta \frac{dG_n(\eta, \eta')}{d\eta} + 2n i G_n(\eta, \eta') = \delta(\eta - \eta') \quad (2.16)$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$

De tal manera que la solución para la ecuación diferencial (2.14) es

$$f_n(\eta) = \frac{2U_0}{\hbar} \sum_{\substack{k+l+1 \leq n \\ k=0,1,\dots \\ l=0,1,\dots}} \int_{-\infty}^{\infty} f_{n-k-l-1}(\eta') f_k^*(\eta') f_l(\eta') G_n(\eta, \eta') d\eta'. \quad (2.17)$$

Antes de proceder a resolver para la función de Green, $G_n(\eta, \eta')$, es conveniente tomar en cuenta la siguiente proposición generalizada de los resultados básicos de mecánica cuántica.

Proposición 2. *La función de Green $G_n(\eta, \eta')$ satisface la ecuación diferencial*

$$\frac{d^2 G_n(\eta, \eta')}{d\eta^2} - i\eta \frac{dG_n(\eta, \eta')}{d\eta} + 2n i G_n(\eta, \eta') = \delta(\eta - \eta'), \quad (2.18)$$

y la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 G_n(\eta, \eta')}{d\eta'^2} + i \frac{d(\eta' G_n(\eta, \eta'))}{d\eta'} + 2n i G_n(\eta, \eta') = \delta(\eta - \eta'). \quad (2.19)$$

Demostración. Sea el operador diferencial $\hat{O} = \frac{d^2}{d\eta^2} - i\eta \frac{d}{d\eta} + 2n i$ y el operador asociado con la función de Green \hat{G}_n , tal que

a)

$$\begin{aligned} \delta(\eta - \eta') &= \int d\eta'' \langle \eta | \hat{O} | \eta'' \rangle \langle \eta'' | \hat{G}_n | \eta' \rangle \\ &= \int d\eta'' \left(\left\langle \eta \left| \frac{d^2}{d\eta^2} \right| \eta'' \right\rangle - i\eta \left\langle \eta \left| \frac{d}{d\eta} \right| \eta'' \right\rangle + 2n i \langle \eta | \eta'' \rangle \right) \langle \eta'' | \hat{G}_n | \eta' \rangle \\ &= \int d\eta'' \left(\frac{d^2}{d\eta^2} \delta(\eta - \eta'') - i\eta \frac{d}{d\eta} \delta(\eta - \eta'') + 2n i \delta(\eta - \eta'') \right) G_n(\eta'', \eta') \\ &= \frac{d^2 G_n(\eta, \eta')}{d\eta^2} - i\eta \frac{dG_n(\eta, \eta')}{d\eta} + 2n i G_n(\eta, \eta') \end{aligned} \quad (2.20)$$

b)

$$\begin{aligned}
\delta(\eta - \eta') &= \int d\eta'' \langle \eta | \hat{G}_n | \eta'' \rangle \langle \eta'' | \hat{O} | \eta' \rangle \\
&= \int d\eta'' \langle \eta | \hat{G}_n | \eta'' \rangle \left(\left\langle \eta'' \left| \frac{d^2}{d\eta''^2} \right| \eta' \right\rangle - i\eta'' \left\langle \eta'' \left| \frac{d}{d\eta''} \right| \eta' \right\rangle + 2n i \langle \eta'' | \eta' \rangle \right) \\
&= \int d\eta'' G_n(\eta, \eta'') \left(\frac{d^2}{d\eta''^2} \delta(\eta'' - \eta') - i\eta'' \frac{d}{d\eta''} \delta(\eta'' - \eta') + 2n i \delta(\eta'' - \eta') \right)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Pero $\delta(\eta'' - \eta') = \delta(\eta' - \eta'')$, $\frac{d}{d\eta''} \delta(\eta'' - \eta') = -\frac{d}{d\eta'} \delta(\eta'' - \eta')$, $\frac{d^2}{d\eta''^2} \delta(\eta'' - \eta') = \frac{d^2}{d\eta'^2} \delta(\eta'' - \eta')$ y $-i\frac{1}{2}\hbar\eta'' \frac{d}{d\eta''} \delta(\eta'' - \eta') = -i\frac{1}{2}\hbar \frac{d}{d\eta'} (\eta' \delta(\eta'' - \eta'))$,

$$\begin{aligned}
\delta(\eta - \eta') &= \int d\eta'' \left(\frac{d^2}{d\eta'^2} + i\frac{d}{d\eta'} \eta' + 2n i \right) (G_n(\eta, \eta'') \delta(\eta'' - \eta')) \\
&= \left(\frac{d^2}{d\eta'^2} + i\frac{d}{d\eta'} \eta' + 2n i \right) \int d\eta'' G_n(\eta, \eta'') \delta(\eta'' - \eta') \\
&= \frac{d^2 G_n(\eta, \eta')}{d\eta'^2} + i\frac{d(\eta' G_n(\eta, \eta'))}{d\eta'} + 2n i G_n(\eta, \eta').
\end{aligned} \tag{2.22}$$

□

Ahora, para encontrar $G_n(\eta, \eta')$ notemos que las ecuaciones (2.18) y (2.19) se escriben como

$$\begin{aligned}
\left(\frac{d}{d\eta} - \frac{1}{2}i\eta \right)^2 G_n(\eta, \eta') + \left[i \left(2n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4}\eta^2 \right] G_n(\eta, \eta') &= \delta(\eta - \eta'), \\
\left(\frac{d}{d\eta'} + \frac{1}{2}i\eta' \right)^2 G_n(\eta, \eta') + \left[i \left(2n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4}\eta'^2 \right] G_n(\eta, \eta') &= \delta(\eta - \eta').
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Consideramos nuevamente la propiedad usada para obtener la ecuación (2.6), para obtener

$$\left(\frac{d}{d\eta} \pm \frac{1}{2}i\eta \right)^2 G_n(\eta, \eta') = e^{-(\pm)\frac{1}{4}i\eta^2} \frac{d^2}{d\eta^2} \left(e^{\pm\frac{1}{4}i\eta^2} G_n(\eta, \eta') \right), \tag{2.24}$$

de tal manera que las ecuaciones (2.23) son reescritas como

$$\begin{aligned}
\left\{ \frac{d^2}{d\eta^2} + \left[i \left(2n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4}\eta^2 \right] \right\} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\} &= \delta(\eta - \eta') e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)}, \\
\left\{ \frac{d^2}{d\eta'^2} + \left[i \left(2n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4}\eta'^2 \right] \right\} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\} &= \delta(\eta - \eta') e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Resolviendo para el caso cuando $\eta \neq \eta'$, consideramos el cambio de variable $u = ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta$ y $u' = ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta'$, estas últimas ecuaciones se pueden dar ahora como

$$\begin{aligned}
\left\{ \frac{d^2}{du^2} - (2n + 1) + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}u^2 \right\} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\} &= 0, \\
\left\{ \frac{d^2}{du'^2} - (2n + 1) + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}u'^2 \right\} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\} &= 0.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Siguiendo la metodología para construir funciones de Green, para algunas ecuaciones de Schrödinger, presentada en las referencias [19, 20], consideramos que la ecuación diferencial

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - (2n + 1) + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}y^2 \right] g(y) = 0, \quad (2.27)$$

la cual tiene como soluciones las funciones cilindro parabólico (para mayor información y propiedades de estas funciones consultar [21]). Además, como $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ entonces $2n + 1$ es entero, por lo tanto, dos soluciones independientes de esta ecuación diferencial son $D_{-(2n+1)}(y)$ y $D_{-(2n+1)}(-y)$. Así, la cantidad $e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta')$ puede tener las siguientes cuatro formas $D_{-(2n+1)}\left(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)$, $D_{-(2n+1)}\left(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)$, $D_{-(2n+1)}\left(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta'\right)$ y $D_{-(2n+1)}\left(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta'\right)$. Sin embargo, es pertinente considerar las siguientes condiciones de frontera para la función de Green

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow -\infty, \infty} |G_n(\eta, \eta')| &= 0, \\ \lim_{\eta' \rightarrow -\infty, \infty} |G_n(\eta, \eta')| &= 0. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Las siguientes propiedades de las funciones cilindro parabólico nos ayudarán a elegir correctamente los productos de funciones involucrados en G_n

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow \infty} |D_{-(2n+1)}\left(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)| &= 0, \\ \lim_{\eta \rightarrow -\infty} |D_{-(2n+1)}\left(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)| &= 0, \\ \lim_{\eta \rightarrow \infty} |D_{-(2n+1)}\left(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)| &= \infty, \\ \lim_{\eta \rightarrow -\infty} |D_{-(2n+1)}\left(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta\right)| &= \infty. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Entonces,

$$e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') = \begin{cases} c_1(\eta') D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) & \text{si } \eta' < \eta \\ c_2(\eta') D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) & \text{si } \eta' > \eta. \end{cases} \quad (2.30)$$

De la continuidad de $G_n(\eta, \eta')$ en $\eta = \eta'$, y por lo tanto, de la expresión $e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta')$, tenemos

$$c_2(\eta) D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) - c_1(\eta) D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) = 0. \quad (2.31)$$

Para el caso de la discontinuidad en la derivada, tomamos en cuenta cualquiera de las ecuaciones en (2.25) y la integramos alrededor de $u = u'$ en un pequeño intervalo

caracterizado por el radio $\epsilon > 0$.

$$\frac{d}{d\eta} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\}_{\eta'=\eta+\epsilon} - \frac{d}{d\eta} \left\{ e^{\frac{1}{4}i(\eta'^2 - \eta^2)} G_n(\eta, \eta') \right\}_{\eta'=\eta-\epsilon} = 1, \quad (2.32)$$

la cual se puede escribir, considerando que $\epsilon \rightarrow 0$, como

$$c_2(\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} - c_1(\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} = 1. \quad (2.33)$$

El sistema de ecuaciones para $c_1(\eta)$ y $c_2(\eta)$ es representado por

$$\begin{pmatrix} D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) & D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) \\ \frac{dD_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} & \frac{dD_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2(\eta) \\ -c_1(\eta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

Este sistema tiene solución única si el determinante Wronskiano siguiente es distinto de cero

$$W = D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} - D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} \quad (2.35)$$

$$= ie^{i\frac{\pi}{4}} \left(D_{-(2n+1)}(u) \frac{dD_{-(2n+1)}(-u)}{du} - D_{-(2n+1)}(-u) \frac{dD_{-(2n+1)}(u)}{du} \right) \quad (2.36)$$

$$= ie^{i\frac{\pi}{4}} \left(D_{-(2n+1)}(u) D_{-2n}(-u) + D_{-(2n+1)}(-u) D_{-2n}(u) \right), \quad (2.37)$$

donde al pasar de la penúltima línea a la última hemos considerado la propiedad

$$\frac{dD_\nu(z)}{dz} = \frac{1}{2} z D_\nu(z) - D_{\nu+1}(z). \quad (2.38)$$

De las ecuaciones $\left\{ \frac{d^2}{du^2} - (2n+1) + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}u^2 \right\} D_{-(2n+1)}(\pm u) = 0$ se obtiene fácilmente que

$$\frac{d}{du} \left(D_{-(2n+1)}(u) \frac{dD_{-(2n+1)}(-u)}{du} - D_{-(2n+1)}(-u) \frac{dD_{-(2n+1)}(u)}{du} \right) = 0. \quad (2.39)$$

Entonces, W es independiente de u y η de tal manera que

$$W = 2ie^{i\frac{\pi}{4}} D_{-(2n+1)}(0) D_{-2n}(0). \quad (2.40)$$

Usando las propiedades $D_p(0) = \frac{2^{p/2}\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{1-p}{2})}$, $\Gamma(n+1) = n!$ y $\Gamma(n + \frac{1}{2}) = \frac{(2n)!\sqrt{\pi}}{2^{2n}n!}$ tenemos la condición necesaria

$$W = ie^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{2\pi}}{(2n)!} \neq 0. \quad (2.41)$$

Esta expresión la podemos reescribir como

$$\frac{-1}{ie^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{2\pi}}{(2n)!}} D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} + \frac{1}{ie^{i\frac{\pi}{4}} \frac{\sqrt{2\pi}}{(2n)!}} D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta) \frac{dD_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)}{d\eta} = 1. \quad (2.42)$$

Comparando la ecuación (2.33) y (2.42) obtenemos que $c_1(\eta) = \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}(2n)!}{\sqrt{2\pi}} D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)$ y $c_2(\eta) = \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}(2n)!}{\sqrt{2\pi}} D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta)$.

Por lo tanto, $\forall n \in \mathbb{N}$

$$G_n(\eta, \eta') = \frac{(2n)!}{\sqrt{2\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{1}{4}i(\eta^2 - \eta'^2)} D_{-(2n+1)} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta_{<} \right] D_{-(2n+1)} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta_{>} \right], \quad (2.43)$$

con $\eta_{<} = \min \{ \eta, \eta' \}$ y $\eta_{>} = \max \{ \eta, \eta' \}$. En particular

$$G_1(\eta, \eta') = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{1}{4}i(\eta^2 - \eta'^2)} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta_{<} \right] D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta_{>} \right]. \quad (2.44)$$

Así, $\forall n \in \mathbb{N}$

$$f_n(\eta) = \frac{2U_0}{\hbar} \frac{(2n)!}{\sqrt{2\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{1}{4}i\eta^2} \sum_{\substack{k+l+1 \leq n \\ k=0,1,\dots \\ l=0,1,\dots}} \int_{-\infty}^{\infty} f_{n-k-l-1}(\eta') f_l^*(\eta') f_k(\eta') \times \\ \times e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-(2n+1)}(ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta_{<}) D_{-(2n+1)}(-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta_{>}) d\eta'. \quad (2.45)$$

Las soluciones en (2.45) permiten construir la solución completa (2.12) para la ecuación diferencial de G-P (2.11) en todo rango de la variable temporal y la variable espacial. Sin embargo, el inconveniente es que se debe resolver una cantidad infinita de integrales, cuyos integrandos tienden a aumentar sus sumandos con el aumento de n , es decir, esta tarea requerirá de mucho tiempo y conocimiento para resolver estas integrales. A pesar de esto, nos es pertinente analizar algunos casos particulares interesantes, los cuales nos permiten verificar que la solución encontrada por este método es correcta, comparándola con los resultados obtenidos por el método numérico descrito más adelante.

2.1.2 Solución para tiempos cortos

En el régimen de tiempos cortos es suficiente con calcular la función de onda hasta orden 1, es decir, consideramos las soluciones $f_0(\eta)$ y $f_1(\eta)$ del conjunto de ecuaciones (2.15), donde la primera ya ha sido calculada. De las expresiones (2.44) y (2.45) se tiene

$$f_1(\eta) = \frac{2U_0}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} G_1(\eta, \eta') |f_0(\eta')|^2 f_0(\eta') d\eta' \\ = \frac{U_0}{4\hbar} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\frac{1}{4}i\pi} e^{\frac{1}{4}i\eta^2} \left\{ D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta \right] \int_{-\infty}^{\eta} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta' \right] \left| \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta' \right] \right|^2 \right. \\ \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta' \right] d\eta' + D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta \right] \int_{\eta}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}} \eta' \right] \left| \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta' \right] \right|^2 \\ \left. \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta' \right] d\eta' \right\}. \quad (2.46)$$

Además, de la expresión (2.10), observamos que

$$\lim_{t \rightarrow 0} \phi_0(x, t) = \lim_{t \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \frac{x}{\sqrt{t}} \right] \right\} = \phi_0(x, 0) = \Theta(-x), \quad (2.47)$$

y de la definición de η , podemos considerar para tiempos cortos que

$$\operatorname{erfc} \left[e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \eta' \right] = 2\Theta(-\eta'). \quad (2.48)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} f_1(\eta) &= \frac{2U_0}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\frac{1}{4}i\pi} e^{\frac{1}{4}i\eta^2} \left\{ D_{-3} \left[-ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta \right] \int_{-\infty}^{\eta} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] \Theta(-\eta') d\eta' \right. \\ &\quad \left. + D_{-3} \left[ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta \right] \int_{\eta}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[-ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] \Theta(-\eta') d\eta' \right\}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

La siguiente aproximación la realizamos en los límites de las integrales, tomando en cuenta que para tiempos cortos

$$\lim_{t \rightarrow 0} \eta = \lim_{t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \frac{x}{\sqrt{t}} = \begin{cases} +\infty & \text{si } \eta > 0 \\ 0 & \text{si } \eta = 0 \\ -\infty & \text{si } \eta < 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Entonces, tenemos

$$f_1(\eta) = \frac{2U_0}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\frac{1}{4}i\pi} e^{\frac{1}{4}i\eta^2} \cdot \begin{cases} D_{-3} \left[-ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta \right] \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[-ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] d\eta' & \text{si } \eta \geq 0 \\ D_{-3} \left[ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta \right] \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] d\eta' & \text{si } \eta < 0. \end{cases} \quad (2.51)$$

De las expresiones 9.210 y 9.240 en [21], escribimos las funciones cilindro parabólicas en términos de las funciones hipergeométricas confluentes de primer tipo como

$$D_p(z) = 2^{\frac{p}{2}} e^{-\frac{1}{4}z^2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1-p}{2}\right)} {}_1F_1\left(-\frac{p}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}z^2\right) - \frac{\sqrt{2\pi}z}{\Gamma\left(-\frac{p}{2}\right)} {}_1F_1\left(\frac{1-p}{2}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2}z^2\right) \right\}. \quad (2.52)$$

De tal manera que,

$$D_{-3} \left[-ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] = 2^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{4}i\eta'^2} \left\{ \sqrt{\pi} {}_1F_1\left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2\right) + 2\sqrt{2}ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' {}_1F_1\left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2\right) \right\} \quad (2.53)$$

$$D_{-3} \left[ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' \right] = 2^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{4}i\eta'^2} \left\{ \sqrt{\pi} {}_1F_1\left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2\right) - 2\sqrt{2}ie^{\frac{i\pi}{4}} \eta' {}_1F_1\left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2\right) \right\}, \quad (2.54)$$

tal que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta' \right] d\eta' &= 2^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\pi} \int_0^\infty {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' \\ &+ ie^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^\infty \eta' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta', \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-\frac{1}{4}i\eta'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}\eta' \right] d\eta' &= 2^{-\frac{3}{2}}\sqrt{\pi} \int_0^\infty {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' \\ &- ie^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^\infty \eta' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta'. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Consideramos el cambio de variable $\eta' = e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{2w}$ con $\frac{1}{2}i\eta'^2 = w$, $d\eta' = e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2w}}dw$ y $\eta'd\eta' = e^{-i\frac{\pi}{2}}dw$, de tal manera que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' &= \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} \int_{\gamma_1(\eta')} w^{\frac{1}{2}-1} {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -w \right) dw \\ &= \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} \int_0^\infty w^{\frac{1}{2}-1} {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -w \right) dw, \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' &= e^{-i\frac{\pi}{2}} \int_{\gamma_1(\eta')} w^{1-1} {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -w \right) dw \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty w^{1-1} {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -w \right) dw. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Hemos considerado que el rayo de integración $\gamma_1(\eta') = \{\frac{1}{2}i\eta'^2 \mid 0 \leq \eta' \leq \infty\}$ se puede deformar a la línea recta real porque no hay cortes ramales en el camino.

Usando la expresión 7.612 en [21],

$$\int_0^\infty t^{b-1} {}_1F_1(a; c; -t) dt = \frac{\Gamma(b)\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)}, \quad 0 < \text{Re}(b) < \text{Re}(a). \quad (2.59)$$

Entonces, tenemos

$$\int_0^\infty {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' = \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2}} \frac{\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})\Gamma(1)}{\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(0)}, \quad (2.60)$$

pero $\Gamma(0) = \infty$, así

$$\int_0^\infty {}_1F_1 \left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' = 0. \quad (2.61)$$

También,

$$\int_0^\infty \eta' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}i\eta'^2 \right) d\eta' = e^{-i\frac{\pi}{2}} \frac{\Gamma(1)\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(1)}{\Gamma(2)\Gamma(\frac{1}{2})} = e^{-i\frac{\pi}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} = -\frac{i}{2}. \quad (2.62)$$

Sustituyendo las expresiones (2.61) y (2.62) en (2.55) y (2.56), luego estas últimas en la expresión (2.51) y definiendo la función

$$\alpha(\eta) = \begin{cases} 1 & \text{si } \eta \geq 0 \\ -1 & \text{si } \eta < 0. \end{cases} \quad (2.63)$$

Entonces,

$$f_1(\eta) = \frac{U_0}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} i e^{i\frac{1}{4}\eta^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}|\eta|} \right] \alpha(\eta). \quad (2.64)$$

De la expresión (2.12), a primer orden en τ , tenemos que la función de onda para la ecuación (2.11), con la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x)$, es

$$\phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} x \right] + \frac{U_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} i t e^{\frac{im}{4\hbar t} x^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \frac{|x|}{\sqrt{t}} \right] \alpha(x) \right]. \quad (2.65)$$

Las gráficas con $y = \sqrt{m/\hbar}x$, $\tau = t$, $m = 1 = \hbar$ y para valores $\bar{U}_0 = \frac{U_0}{\hbar} = -10, 0, 10$ se muestran en la figura 2.1. En estas gráficas de densidad observamos que conforme U_0 aumenta, las cáusticas (regiones con mayor densidad de partículas) tienden a moverse hacia la posición de la pared del obturador. Además, la primera franja amarilla, correspondiente a mayor densidad, cerca del borde, tiende a ensancharse conforme el mismo crecimiento del acoplamiento. La escala de color de ambas gráficas es el mismo, ya que a pesar de que los valores máximos de la densidad dependen de la constante de acoplamiento, no se afecta la escala de color, dado que ambos máximos están en un rango muy estrecho.

Aplicamos la Proposición 1 para el caso de la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \Theta(-x)$, cuya solución correspondiente es

$$\phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) \right] + \frac{U_0}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi}} i t e^{\frac{im}{4\hbar t} \left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right)^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \frac{|x - \frac{\hbar k}{m} t|}{\sqrt{t}} \right] \alpha(x) \right\}. \quad (2.66)$$

2.1.3 Solución para tiempos largos y estabilidad de Bogoliubov

En esta sección presentamos dos metodologías para obtener soluciones a la ecuación (2.11) en el régimen de tiempos largos. La primera parte es un análisis de estabilidad alrededor de la solución estacionaria para tiempos largos. Mientras que la segunda parte corresponde al uso de series, dado el comportamiento asintótico considerado.

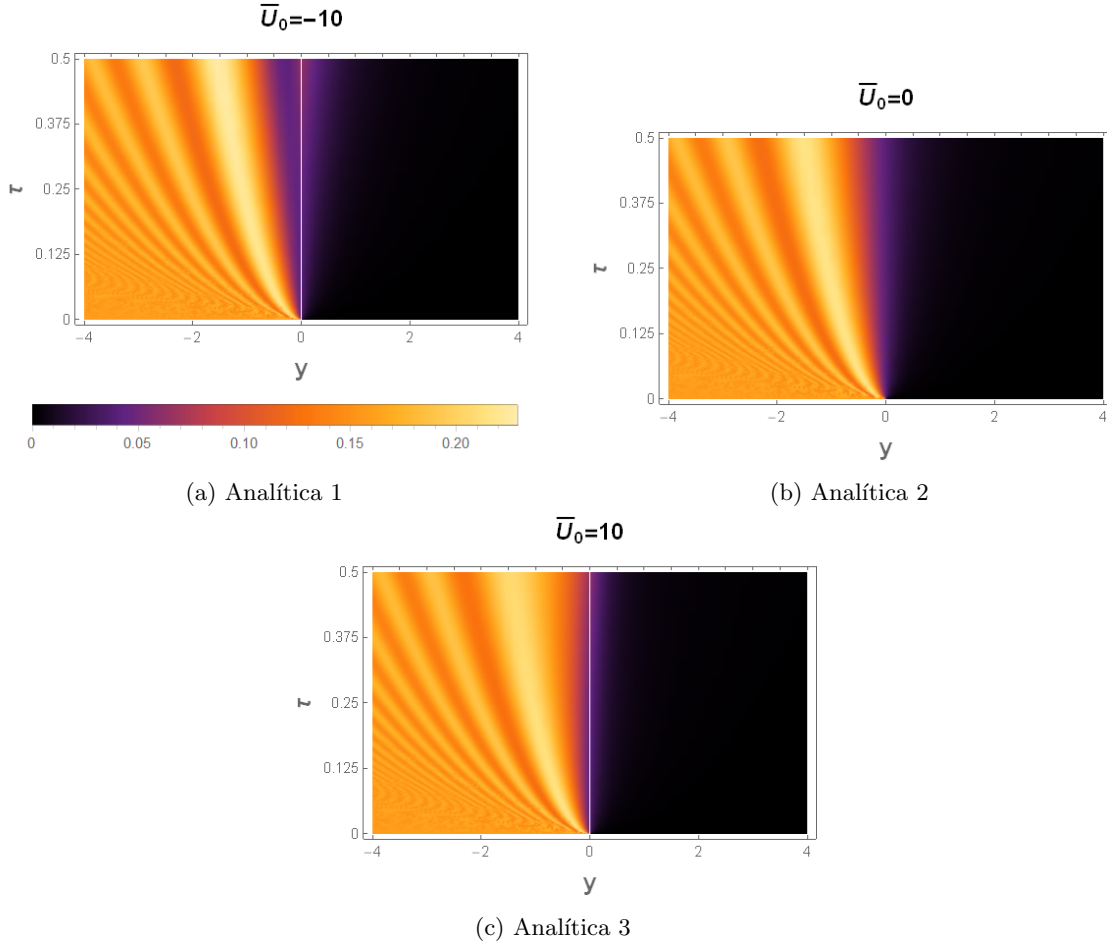


Figura 2.1: Solución analítica para el caso del obturador. Gráfica de densidad para la función $|\phi(y, \tau)|^2$, correspondiente al valor de la constante de acoplamiento para el caso (a) $\bar{U}_0 = -10$, (b) $\bar{U}_0 = 0$ y (c) $\bar{U}_0 = 10$. Conforme \bar{U}_0 crece, los contornos con mayor densidad se ensanchan más y se desplazan hacia el borde.

Análisis de estabilidad alrededor de la solución estacionaria.

Notando que la solución de Moshinsky, expresión (2.2), para la ecuación (2.1), a tiempos largos, tiene la forma

$$\phi_0(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m}\right)}, \quad (2.67)$$

con la condición inicial $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x) e^{ikx}$. Esperamos que la solución para la ecuación diferencial de G-P en 1D, con esta misma condición inicial y en esta misma región de interés, decaiga a la solución estacionaria o de equilibrio de esta ecuación. Por lo tanto,

es pertinente considerar que la solución buscada tenga la forma

$$\phi(x, t) = \phi_\infty(x, t) + \delta\phi(x, t), \quad (2.68)$$

donde la solución estacionaria de G-P, encontrada para este problema, es

$$\phi_\infty(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left[kx - \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{U_0}{2\pi\hbar}\right)t\right]}. \quad (2.69)$$

Mientras que la perturbación, $\delta\phi(x, t)$, se determina tomando en cuenta que debe tener un comportamiento con decaimiento en el tiempo, de tal manera que cuando el tiempo de propagación es muy grande, $t \rightarrow \infty$, $|\delta\phi(x, t)|^2 \rightarrow 0$ y $(\delta\phi(x, t))^2 \rightarrow 0$.

Al sustituir (2.68) en la ecuación G-P, (2.11), y tomando en cuenta las consideraciones anteriores, obtuvimos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \delta\phi}{\partial x^2} + \frac{U_0}{2\pi} \delta\phi + 2U_0 \text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*] \phi_\infty = i\hbar \frac{\partial \delta\phi}{\partial t}. \quad (2.70)$$

Esta ecuación diferencial nos permitió construir el siguiente sistema de ecuaciones acopladas

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*] + \frac{U_0}{\pi} \text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*] = \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \text{Im}[\phi_\infty \delta\phi^*] \quad (2.71)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \text{Im}[\phi_\infty \delta\phi^*] = \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*], \quad (2.72)$$

con los cambios de variable

$$y = x - \frac{\hbar kt}{m}, \quad (2.73)$$

$$\tau = t. \quad (2.74)$$

Motivados por las propiedades de la función en (2.69), buscamos que los términos $\text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*]$ y $\text{Im}[\phi_\infty \delta\phi^*]$ tuvieran un comportamiento oscilatorio en la variable y , lo cual nos llevó a un comportamiento con decaimiento exponencial en el tiempo, como esperábamos debido a las condiciones de $\delta\phi$, obteniendo así

$$\text{Im}[\phi_\infty \delta\phi^*] = \sqrt{-1 - \frac{2mU_0}{\pi\hbar^2\kappa^2}} \text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*], \quad (2.75)$$

$$\text{Re}[\phi_\infty \delta\phi^*] = [a_1 \text{Cos}(\kappa y) + b_1 \text{Sen}(\kappa y)] e^{-\frac{\hbar\kappa^2}{2m} \sqrt{-1 - \frac{2mU_0}{\pi\hbar^2\kappa^2}} \tau}, \quad (2.76)$$

donde κ es un parámetro que satisface las siguientes condiciones

$$U_0 < 0, \quad (2.77)$$

$$0 < |\kappa| < \sqrt{-\frac{2mU_0}{\pi\hbar^2}}. \quad (2.78)$$

Entonces, solo bajo las condiciones anteriores la solución correspondiente a excitaciones elementales de un condensado de Bose, para tiempos muy largos después de la propagación, es

$$\begin{aligned} \phi(x, t) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left[kx - \left(\frac{\hbar k^2}{2m} + \frac{U_0}{2\pi\hbar}\right)t\right]} \left[1 \right. \\ & \left. + \left(1 - i\sqrt{-1 - \frac{2mU_0}{\pi\hbar^2\kappa^2}} \right) A \text{Cos}(\kappa y + B) e^{-\frac{\hbar\kappa^2}{2m} \sqrt{-1 - \frac{2mU_0}{\pi\hbar^2\kappa^2}} t} \right]. \end{aligned} \quad (2.79)$$

De esta última expresión podemos obtener la solución para la condición inicial $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x)$ haciendo $k = 0$.

El inconveniente de la solución encontrada es que sólo sirve para los casos de constante de acoplamiento, U_0 , negativa, la cual a la vez restringe el valor del nuevo parámetro usado, κ . Más aún, quedan dos constantes, A y B por determinar, las cuales se pueden obtener usando información del método numérico o de datos experimentales.

El objetivo de este enfoque fue presentar algunas alternativas que permitan usar la solución estacionaria del condensado en forma de un solitón para tiempos largos e incorporar pequeñas perturbaciones alrededor de ésta.

Como conclusión se tiene que el decaimiento exponencial de las soluciones hacia casos estacionarios como la onda plana corregida para el condensado, solamente es posible para valores restringidos del acoplamiento y no es posible resolver todo problema no lineal con esta metodología (propuesta por Bogoliubov [22]). Por esta razón, en este trabajo, proponemos un nuevo método que funciona para cualquier valor de acoplamiento U_0 y tiempos largos, el cual se expone a continuación.

Solución mediante el uso de series

Para superar algunas limitaciones presentadas en la metodología anterior, proponemos otra basada en el uso de series. La ventaja de esta nueva propuesta es que sirve tanto para el problema del obturador como para la rendija de difracción.

Tomando en cuenta la ecuación diferencial G-P en 1D

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 |\phi(x, t)|^2 \right\} \phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t}. \quad (2.80)$$

En el caso de tiempos largos tanto para el problema del obturador como el de la rendija de difracción, buscamos una solución que contenga la función de onda que resuelve el caso lineal, la $\phi_0(x, t)$, para cada problema correspondiente, más otra función $\psi(x, t)$ que depende al

menos del orden 1 en U_0 . Estas consideraciones permiten aprovechar las propiedades de las $\phi_0(x, t)$'s a tiempos muy grandes y trabajar con U_0 pequeñas independientes del signo para poder realizar algunas aproximaciones en el uso de series. Para ambos casos consideramos el siguiente *ansatz*

$$\phi(x, t) = \phi_0(x, t) + \psi(x, t), \quad (2.81)$$

con la consideración

$$\psi(x, t) \sim O_1(U_0). \quad (2.82)$$

Al sustituir (2.81) en (2.80) y tomando en cuenta que para acoplamiento pequeño podemos despreciar los términos $U_0\psi(x, t) \sim O_2(U_0)$, $U_0\psi^*(x, t) \sim O_2(U_0)$, $U_0|\psi(x, t)|^2 \sim O_3(U_0)$, $U_0(\psi(x, t))^2 \sim O_3(U_0)$ y $U_0|\psi(x, t)|^2\psi(x, t) \sim O_4(U_0)$ y quedarnos sólo con el término lineal en U_0 , obtenemos la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -U_0 |\phi_0(x, t)|^2 \phi_0(x, t). \quad (2.83)$$

Notamos que la forma de la ecuación anterior coloca la no linealidad como una fuente conocida. Después, aprovechamos el comportamiento de la función $\phi_0(x, t)$ en el caso de tiempos largos haciendo uso de su forma de serie para cada problema. Para esto, usamos la función de Green de la ecuación de Schrödinger libre en una dimensión, cuya forma es bien conocida,

$$G_0(x, x'; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}}, \quad (2.84)$$

de tal manera que cualquier solución libre, que satisface el problema de valores iniciales, es escrita en la forma:

$$\phi_0(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_0(x, x'; t) \phi_0(x', 0) dx'. \quad (2.85)$$

En el caso del obturador, consideramos la condición inicial $\phi_0(x', 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(-x)$, y obtenemos

$$\begin{aligned} \phi_0(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{i\hbar t}} \int_{-\infty}^0 e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} dx' = \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}x}^{\infty} e^{iu^2} du \\ &= \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \left[\int_0^{\infty} e^{iu^2} du - \int_0^{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}x} e^{iu^2} du \right] = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}x} e^{iu^2} du. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Donde $\int_0^{\infty} e^{iu^2} du = e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{4}}$. Además, dado que estamos en el régimen de tiempos largos, $t \rightarrow \infty$, entonces vamos a considerar que el término $\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}x$ es muy cercano a 0, con el

supuesto de que x es finito. De esta manera, usando la serie de e^{iu^2} obtenemos la siguiente serie convergente para t distinto de cero

$$\phi_0(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{t^{n+1/2}}, \quad (2.87)$$

con

$$A_n(x) = \frac{i^{n-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi}(2n+1)n!} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}} x^{2n+1}, \quad (2.88)$$

$$A_n(-x) = -A_n(x). \quad (2.89)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \\ & -U_0 \left\{ \frac{1}{16\pi\sqrt{2\pi}} + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \sum_{\alpha=1}^{\infty} \sum_{\substack{l+1 \leq \alpha \\ l=0,1,\dots}} \frac{[2A_l(x)A_{\alpha-l-1}^*(x) + A_l(x)A_{\alpha-l-1}(x)]}{t^\alpha} \right\} \\ & + U_0 \left\{ \frac{1}{8\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[2A_m(x) + A_m^*(x)]}{t^{m+1/2}} + \sum_{\alpha=1}^{\infty} \sum_{\substack{l+n+1 \leq \alpha \\ l=0,1,\dots \\ n=0,1,\dots}} \frac{A_l(x)A_{\alpha-l-n-1}^*(x)A_n(x)}{t^{\alpha+1/2}} \right\}. \end{aligned}$$

Notando que la primera cantidad entre paréntesis del lado derecho de la ecuación anterior es par con respecto a x y con potencias $0, -1, -2, -3, \dots$ en t , mientras que la segunda cantidad entre paréntesis es impar respecto a x y con potencias $-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}, \dots$ en t . Proponemos una solución que herede estas propiedades de la fuente, es decir,

$$\psi(x, t) = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left[\frac{B_\alpha(x)}{t^\alpha} + \frac{C_\alpha(x)}{t^{\alpha+1/2}} \right], \quad (2.90)$$

donde $B_\alpha(-x) = B_\alpha(x)$ y $C_\alpha(-x) = -C_\alpha(x)$, ya que de lo contrario se llega a una contradicción. Además, es importante recalcar nuestra suposición inicial, dado que $\psi(x, t) \sim O_1(U_0)$, entonces cuando $U_0 \rightarrow 0$, $\psi(x, t) \rightarrow 0$, pero esto se cumple si $B_\alpha(x) \rightarrow 0, C_\alpha(x) \rightarrow 0$ para los valores de $\alpha = 0, 1, 2, 3, \dots$

Así,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}B_0''(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{B_1''(x)}{t} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{C_0''(x)}{t^{1/2}} + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}C_1''(x) + \frac{1}{2}i\hbar C_0(x)\right)\frac{1}{t^{3/2}} \\
& + \sum_{\alpha=2}^{\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}B_{\alpha}''(x) + i\hbar(\alpha-1)B_{\alpha-1}(x)\right]\frac{1}{t^{\alpha}} + \sum_{\alpha=2}^{\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}C_{\alpha}''(x) + i\hbar(\alpha-\frac{1}{2})C_{\alpha-1}(x)\right]\frac{1}{t^{\alpha+1/2}} \\
& = -\frac{U_0}{16\pi\sqrt{2\pi}} - \frac{U_0}{2\sqrt{2\pi}}\frac{A_0(x)(2A_0^*(x) + A_0(x))}{t} + \frac{U_0}{8\pi}\frac{(2A_0(x) + A_0^*(x))}{t^{1/2}} \\
& + \left(\frac{U_0}{8\pi}(2A_1(x) + A_1^*(x)) + U_0A_0(x)A_0^*(x)A_0(x)\right)\frac{1}{t^{3/2}} \tag{2.91} \\
& - \frac{U_0}{2\sqrt{2\pi}}\sum_{\alpha=2}^{\infty}\sum_{\substack{l+1\leq\alpha \\ l=0,1,\dots}}\frac{[2A_l(x)A_{\alpha-l-1}^*(x) + A_l(x)A_{\alpha-l-1}(x)]}{t^{\alpha}} + \frac{U_0}{8\pi}\sum_{\alpha=2}^{\infty}\frac{[2A_{\alpha}(x) + A_{\alpha}^*(x)]}{t^{\alpha+1/2}} \\
& + U_0\sum_{\alpha=2}^{\infty}\sum_{\substack{l+n+1\leq\alpha \\ l=0,1,\dots \\ n=0,1,\dots}}\frac{A_l(x)A_{\alpha-l-n-1}^*(x)A_n(x)}{t^{\alpha+1/2}}.
\end{aligned}$$

Dado que todas las potencias de t son linealmente independientes igualamos los coeficientes de cada potencia.

Todo este proceso se puede expresar de manera compacta, utilizando notación matricial y vectorial, obteniendo las siguientes ecuaciones

$$\frac{d^2}{dx^2}\vec{B}(x) - \frac{2mi}{\hbar}\mathbf{M}\vec{B}(x) = \vec{F}(x), \tag{2.92}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\vec{C}(x) - \frac{2mi}{\hbar}\mathbf{N}\vec{C}(x) = \vec{G}(x), \tag{2.93}$$

con

$$\vec{B}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ B_0(x) \\ B_1(x) \\ B_2(x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \vec{C}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ C_0(x) \\ C_1(x) \\ C_2(x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \vec{F}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ f_0(x) \\ f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \vec{G}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ g_0(x) \\ g_1(x) \\ g_2(x) \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{2.94}$$

y las matrices \mathbf{M} y \mathbf{N} son construidas de la forma explícita como matrices de diagonal

secundaria que permite resolver por iteraciones de la recurrencia, es decir, de la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1-1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2-1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 3-1 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \mathbf{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1-\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2-\frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 3-\frac{1}{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.95)$$

donde las propiedades de las funciones B_α y C_α son heredadas a los vectores \vec{B} y \vec{C} .

La otra forma más explícita es resolver cada ecuación diferencial tomando en cuenta las funciones de las cuales depende en forma recurrente, nuevamente se toma en cuenta las propiedades de las funciones $B_\alpha(x)$ y $C_\alpha(x)$. Entonces, obtenemos

$$B_0(x) = \frac{mU_0}{16\pi\sqrt{2\pi}\hbar^2} x^2, \quad (2.96)$$

$$B_1(x) = \frac{m^2U_0}{48\pi^2\sqrt{2\pi}\hbar^3} \left(2 + e^{-i\frac{\pi}{2}}\right) x^4, \quad (2.97)$$

$$C_0(x) = -\frac{mU_0}{24\sqrt{2\pi}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2e^{-i\frac{\pi}{4}} + e^{i\frac{\pi}{4}}\right) x^3, \quad (2.98)$$

$$C_1(x) = -\frac{mU_0}{20\sqrt{2\pi}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{3}e^{i\frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\pi}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right) x^5. \quad (2.99)$$

Y para valores de $n = 2, 3, 4, 5, \dots$ se tienen las relaciones de recurrencia

$$B''_\alpha(x) = \frac{2mi}{\hbar}(\alpha-1)B_{\alpha-1}(x) + \frac{mU_0}{\sqrt{2\pi}\hbar^2} \sum_{\substack{l+1 \leq \alpha \\ l=0,1,\dots}} [2A_l(x)A_{\alpha-l-1}^*(x) + A_l(x)A_{\alpha-l-1}(x)], \quad (2.100)$$

$$\begin{aligned} C''_\alpha(x) = & -\frac{U_0m}{4\pi\hbar^2} [2A_\alpha(x) + A_\alpha^*(x)] + \frac{2im}{\hbar} \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) C_{\alpha-1}(x) \\ & - \frac{2mU_0}{\hbar^2} \sum_{\substack{l+n+1 \leq \alpha \\ l=0,1,\dots \\ n=0,1,\dots}} A_l(x)A_{\alpha-l-n-1}^*(x)A_n(x). \end{aligned} \quad (2.101)$$

Tomando en cuenta las primeras potencias de la serie, la corrección a tiempos largos es

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = U_0 \left[\frac{m}{16\pi\sqrt{2\pi}\hbar^2} x^2 + \frac{m^2}{48\pi^2\sqrt{2\pi}\hbar^3} \left(2 + e^{-i\frac{\pi}{2}}\right) \frac{x^4}{t} - \frac{m}{24\sqrt{2\pi}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2e^{-i\frac{\pi}{4}} \right. \right. \\ \left. \left. + e^{i\frac{\pi}{4}}\right) \frac{x^3}{t^{1/2}} - \frac{m}{20\sqrt{2\pi}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{3}e^{i\frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\pi}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right) \frac{x^5}{t^{3/2}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Mientras que la función de onda completa es

$$\begin{aligned} \phi(x, t) = & \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{n-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi}(2n+1)n!} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}} x^{2n+1} \frac{1}{t^{n+1/2}} \\ + U_0 \left[& \frac{m}{16\pi\sqrt{2\pi}\hbar^2} x^2 + \frac{m^2}{48\pi^2\sqrt{2\pi}\hbar^3} \left(2 + e^{-i\frac{\pi}{2}}\right) \frac{x^4}{t} - \frac{m}{24\sqrt{2\pi^2}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2e^{-i\frac{\pi}{4}} \right. \right. \\ & \left. \left. + e^{i\frac{\pi}{4}}\right) \frac{x^3}{t^{1/2}} - \frac{m}{20\sqrt{2\pi^2}\hbar^2} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{3}e^{i\frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\pi}e^{-i\frac{\pi}{4}}\right) \frac{x^5}{t^{3/2}} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.103)$$

Para el caso de la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\Theta(-x)e^{ikx}$ aplicamos una transformación galileana para obtener la solución a t final justo como se demostró al principio de este capítulo. Este método de solución tiene la ventaja de eliminar todas las constantes indeterminadas, además de que involucra tanto valores positivos, negativos y cero del acoplamiento. Debemos notar que la única limitante de este algoritmo es la retención del primer orden en el acoplamiento, mientras que para segundo orden debemos corregir nuevamente la fuente usando la solución previa. Dado que esta generalización es obvia, no la desarrollaremos más a lo largo de este capítulo.

Esta solución es más exacta para describir el fenómeno de un condensado a tiempos largos cuanto más términos de la serie sean considerados. Con los primeros términos de la serie tenemos un buen comportamiento en la región paraxial de la rejilla, pero se necesitan más términos para examinar las regiones más externas, es decir, donde el haz decae rápidamente. A pesar estas limitaciones, esta solución sirve para reconocer que a tiempos largos la constante de acoplamiento, U_0 , corrige tanto la magnitud como la fase de la onda encontrada que describe el problema lineal, sin acoplamiento.

2.2 Rendija de difracción y potencial externo nulo

Siguiendo la metodología de Moshinsky en el artículo [18], obtuvimos la solución para la ec. (2.1) con la condición inicial simétrica $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} [1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$ y cuya expresión es

$$\phi_0(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2}\right) \right] \right\} + \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{L}{2}\right) \right] \right\}. \quad (2.104)$$

Esta expresión también es simétrica.

En esta sección pretendemos usar toda la teoría ya desarrollada pero con la rendija. Para ello tenemos que demostrar que a tiempos cortos se puede aproximar el resultado no lineal por la suma de los dos resultados de borde, también no lineales.

2.2.1 Solución en el régimen de tiempos cortos.

Motivados por este resultado consideramos para tiempos cortos una solución para la ecuación de G-P en 1D, (2.11), de la siguiente forma

$$\phi(x, t) = \phi_0(x, t) + U_0 t f(u, v), \quad (2.105)$$

con U_0 una cantidad pequeña y las nuevas variables están definidas como

$$\begin{aligned} u &= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2}\right), \\ v &= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(x - \frac{L}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.106)$$

Sustituimos la expresión (2.105) en la ecuación (2.11). Considerando que $\phi_0(x, t)$ satisface la ecuación (2.1), y que la constante de acoplamiento U_0 es una cantidad pequeña, tomamos en cuenta sólo las potencias de orden 1 en esta constante y el tiempo. Así, llegamos a la ecuación diferencial para $f = f\left(\frac{x-L/2}{\sqrt{t}}, \frac{-x-L/2}{\sqrt{t}}\right)$, cuya forma es

$$\frac{\hbar^2}{2m} t \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + |\phi_0|^2 \phi_0 - i\hbar f - i\hbar t \frac{\partial f}{\partial t} = 0, \quad (2.107)$$

donde hemos definido

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{m}{\hbar t} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} - 2 \frac{\partial^2 f}{\partial u \partial v} + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} \right), \quad \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{2t} \left(u \frac{\partial f}{\partial u} + v \frac{\partial f}{\partial v} \right). \quad (2.108)$$

Para obtener la ecuación diferencial

$$\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} - 2 \frac{\partial^2 f}{\partial u \partial v} + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + 2if - iu \frac{\partial f}{\partial u} - iv \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{2}{\hbar} |\phi_0(x, t)|^2 \phi_0(x, t). \quad (2.109)$$

Ahora, observemos que para tiempos cortos $\phi_0(x, t)$ no se desvía mucho de la condición inicial. Además, para tiempos cortos $\phi_0(x, t)$ es una superposición de dos ondas que se propagan desde cada borde, de tal manera que el producto de éstas es casi cero, ya que no se han mezclado de manera apreciable, incluso en el tiempo de enfocamiento. Entonces podemos considerar que

$$\begin{aligned} |\phi_0(x, t)|^2 &\approx \frac{1}{L} \left[1 - \Theta\left(-x - \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right] \left[1 - \Theta\left(-x - \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{L} \left[1 - \Theta\left(-x - \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{L}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
|\phi_0(x, t)|^2 \phi_0(x, t) &\approx \frac{1}{L} \left[1 - \Theta \left(-x - \frac{L}{2} \right) - \Theta \left(x - \frac{L}{2} \right) \right] \\
&\cdot \left[\frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2} \right) \right] \right\} \right. \\
&+ \left. \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right] \right\} \right] \\
&\approx \frac{1}{2L^{\frac{3}{2}}} \left[\left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2} \right) \right] \right\} + \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right] \right\} \right].
\end{aligned} \tag{2.111}$$

En la última aproximación de (2.111) notamos que la contribución distinta de cero de $\phi_0(x, t)$ está en el rango $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ y a tiempos cortos el producto del paquete cuadrado con la función de onda no se desvía mucho de la función de onda solamente. Se tiene

$$\begin{aligned}
|\phi_0(x, t)|^2 \phi_0(x, t) &= \frac{1}{2L^{\frac{3}{2}}} \left[\left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} u \right] \right\} + \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} v \right] \right\} \right] \\
&= \frac{1}{2L^{\frac{3}{2}}} [M(u) + M(v)],
\end{aligned} \tag{2.112}$$

con

$$M(u) = 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} u \right], \quad M(v) = 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} v \right]. \tag{2.113}$$

Así, la ecuación (2.109) es escrita como

$$\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} - 2 \frac{\partial^2 f}{\partial u \partial v} + \frac{\partial^2 f}{\partial u^2} + 2if - iu \frac{\partial f}{\partial u} - iv \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} [M(u) + M(v)]. \tag{2.114}$$

Como la fuente $\rho(u, v) = \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} [M(u) + M(v)]$ es separable en forma de suma, demandamos en esta aproximación que $f(u, v)$ sea separable en forma de suma, es decir,

$$f(u, v) = U(u) + V(v). \tag{2.115}$$

Entonces, la ecuación (2.114) se desacopla en un sistema de dos ecuaciones de la forma

$$\frac{d^2 U(u)}{du^2} - iu \frac{dU(u)}{du} + 2iU(u) = \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} (c + M(u)), \tag{2.116}$$

$$\frac{d^2 V(v)}{dv^2} - iv \frac{dV(v)}{dv} + 2iV(v) = \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} (-c + M(v)). \tag{2.117}$$

Cada una de estas ecuaciones puede ser resuelta con ayuda de la función de Green dada en la expresión (2.44), ya que esta función corresponde a este tipo de ecuaciones diferenciales.

La función que buscamos tiene la forma

$$\begin{aligned}
f(u, v) &= \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} \left\{ c \left[- \int_{-\infty}^{\infty} G_1(v, v') dv' + \int_{-\infty}^{\infty} G_1(u, u') du' \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[\int_{-\infty}^{\infty} G_1(u, u') M(u') du' + \int_{-\infty}^{\infty} G_1(v, v') M(v') dv' \right] \right\} \\
&= \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} \{ c [-F_1(v) + F_1(u)] + [F_2(u) + F_2(v)] \}, \tag{2.118}
\end{aligned}$$

donde $F_1(u)$, $F_1(v)$, $F_2(u)$ y $F_2(v)$ son las integrales que aparecen entre corchetes en la ec. (2.118). De las definiciones de u y v observamos que cuando $x \rightarrow -x$, se cumple $u \rightarrow v$ y $v \rightarrow u$. Además, dado que $\phi_0(x, 0)$ es simétrica en x y como la simetría se hereda, entonces $\phi(x, t)$ es simétrico en x . De (2.105) observamos que f debe ser simétrico con respecto a x , entonces $f(u, v) = f(v, u)$, lo cual implica que $c = 0$ y que

$$\begin{aligned}
f(u, v) &= \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} G_1(u, u') M(u') du' + \int_{-\infty}^{\infty} G_1(v, v') M(v') dv' \right\} \\
&= \frac{1}{\hbar L^{\frac{3}{2}}} [F_2(u) + F_2(v)]. \tag{2.119}
\end{aligned}$$

Observamos que sólo basta calcular $F_2(u)$. Sustituyendo la función de Green (2.44) en las variables (u, u') y la función (2.113) tenemos

$$\begin{aligned}
F_2(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} G_1(u, u') M(u') du' \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{1}{4}iu^2} \left[D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u \right] \int_{-\infty}^u e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] \right\} du' \right. \\
&\quad \left. + D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u \right] \int_u^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] \right\} du' \right]. \tag{2.120}
\end{aligned}$$

Tomamos en cuenta que

$$1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] = - \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] \right\}. \tag{2.121}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}
F_2(u) &= \\
&\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{1}{4}iu^2} \left[D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u \right] \int_{-\infty}^u e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] \right\} du' \right. \\
&\quad \left. - D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u \right] \int_u^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}}u' \right] \right\} du' \right]. \tag{2.122}
\end{aligned}$$

Por otro lado, de la expresión $u = \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2}\right)$, al igual que la de v , tenemos los siguientes casos

$$\lim_{t \rightarrow 0} u = \lim_{t \rightarrow 0} \left[\sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2}\right) \right] = \begin{cases} +\infty & \text{si } u > 0 \\ 0 & \text{si } u = 0 \\ -\infty & \text{si } u < 0. \end{cases} \quad (2.123)$$

De tal manera que podemos aproximar, para tiempos cortos, el siguiente valor de la integral

$$F_2(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\frac{1}{4}i\pi} e^{\frac{1}{4}iu^2} \times \begin{cases} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u\right] \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \left\{1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right]\right\} du' & \text{si } u > 0 \\ -D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u\right] \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \left\{1 - \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right]\right\} du' & \text{si } u < 0 \\ 0 & \text{si } u = 0. \end{cases} \quad (2.124)$$

Notemos que sólo debemos resolver una integral ya que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \left\{1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right]\right\} du' = \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \left\{1 - \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right]\right\} du'. \end{aligned} \quad (2.125)$$

De la definición de u , podemos considerar que para tiempos cortos o $t \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right] &= 2\Theta(-u'), \\ \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right] &= 2\Theta(u'). \end{aligned} \quad (2.126)$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \left\{1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\frac{1}{\sqrt{2}}u'\right]\right\} du' \\ = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \{1 - 2\Theta(u')\} du' \\ = - \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} \left\{ D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] - D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] \right\} du'. \end{aligned} \quad (2.127)$$

Observemos que de las expresiones (2.53) y (2.54) se tiene

$$D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] - D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}}u'\right] = -2ie^{i\frac{\pi}{4}}e^{\frac{1}{4}iu'^2} u' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}iu'^2\right). \quad (2.128)$$

Así,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} u' \right] \right\} du' \\ &= 2ie^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^{\infty} u' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}iu'^2 \right) du'. \end{aligned} \quad (2.129)$$

Considerando el cambio de variable $u' = e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{2w}$, $du' = e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2w}} dw$ y $u' du' = -i dw$, entonces

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} u' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}iu'^2 \right) du' &= -i \int_{\gamma_2(\eta')} w^{1-1} {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -w \right) dw \\ &= -i \int_0^{\infty} w^{1-1} {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -w \right) dw. \end{aligned} \quad (2.130)$$

Hemos considerado que el rayo de integración $\gamma_2(\eta') = \{\frac{1}{2}i\eta'^2 \mid 0 \leq \eta' \leq \infty\}$ se puede deformar a la línea recta real porque no hay cortes ramales en el camino.

Usando nuevamente la ec. (2.59), tenemos

$$\int_0^{\infty} u' {}_1F_1 \left(2; \frac{3}{2}; -\frac{1}{2}iu'^2 \right) du' = -i \left\{ \frac{\Gamma(1)\Gamma(\frac{3}{2})\Gamma(1)}{\Gamma(2)\Gamma(\frac{1}{2})} \right\} = -i \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} = -\frac{i}{2}, \quad (2.131)$$

entonces

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[-ie^{i\frac{\pi}{4}} u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} u' \right] \right\} du' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{4}iu'^2} D_{-3} \left[ie^{i\frac{\pi}{4}} u' \right] \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} u' \right] \right\} du' = e^{i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (2.132)$$

Definiendo la función signo

$$\operatorname{sgn}(u) = \begin{cases} 1 & \text{si } u > 0 \\ 0 & \text{si } u = 0 \\ -1 & \text{si } u < 0. \end{cases} \quad (2.133)$$

Entonces,

$$F_2(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} ie^{i\frac{1}{4}u^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} |u| \right] \operatorname{sgn}(u), \quad (2.134)$$

$$F_2(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} ie^{i\frac{1}{4}v^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} |v| \right] \operatorname{sgn}(v). \quad (2.135)$$

Tomando en cuenta la definición de u y v tenemos entonces que

$$\begin{aligned}
f(u, v) &= f\left(\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left(x - \frac{L}{2}\right), \sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left(-x - \frac{L}{2}\right)\right) \\
&= \frac{i}{\hbar L^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left\{e^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(-x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|-x - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(-x - \frac{L}{2}\right)\right. \\
&\quad \left.+e^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|x - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(x - \frac{L}{2}\right)\right\}. \tag{2.136}
\end{aligned}$$

Así, la expresión (2.105) es escrita como

$$\begin{aligned}
\phi(x, t) &= \frac{1}{2\sqrt{L}}\left\{1 - \operatorname{erfc}\left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}\left(-x - \frac{L}{2}\right)\right]\right. \\
&\quad \left.+ \frac{2iU_0}{L\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi}}te^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(-x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|-x - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(-x - \frac{L}{2}\right)\right\} \\
&\quad + \frac{1}{2\sqrt{L}}\left\{1 - \operatorname{erfc}\left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}\left(x - \frac{L}{2}\right)\right]\right. \\
&\quad \left.+ \frac{2iU_0}{L\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi}}te^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|x - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(x - \frac{L}{2}\right)\right\}, \tag{2.137}
\end{aligned}$$

para la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}}[1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$.

Mientras que para la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}[1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$, aplicamos la proposición 1, para este caso obtenemos

$$\begin{aligned}
\phi(x, t) &= \frac{1}{2\sqrt{L}}e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}\left\{1 - \operatorname{erfc}\left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}\left(-\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right)\right]\right. \\
&\quad \left.+ \frac{2iU_0}{L\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi}}te^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(-x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|-\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(-\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right)\right\} \\
&\quad + \frac{1}{2\sqrt{L}}e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}\left\{1 - \operatorname{erfc}\left[-e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}\left(\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right)\right]\right. \\
&\quad \left.+ \frac{2iU_0}{L\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi}}te^{i\frac{m}{4\hbar t}\left(x - \frac{L}{2}\right)^2}D_{-3}\left[e^{-i\frac{\pi}{4}}\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\left|\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right|\right]\operatorname{sgn}\left(\left(x - \frac{\hbar k}{m}t\right) - \frac{L}{2}\right)\right\}. \tag{2.138}
\end{aligned}$$

Las expresiones en (2.137) y (2.138), a pesar de tener las primeras correcciones en la serie, aproximan muy bien el comportamiento de la función de onda para tiempos cortos, como se verá en la comparación de gráficos con el método numérico en el siguiente capítulo. Ambas expresiones encontradas muestran el carácter difractivo, como se esperaba desde inicios de este trabajo.

2.2.2 Renormalización de la función de onda a tiempos cortos

Un aspecto muy importante que debemos tomar en cuenta es que la constante de normalización se debe redefinir, cuestión bien conocida en teoría de perturbaciones aplicada a funciones de onda. En nuestro caso las expresiones (2.137) y (2.138) aun no están normalizadas. Por lo que procedemos al cálculo de las funciones de onda normalizadas. Además, recordemos que ambas ondas tienen la misma expresión de la norma, entonces es conveniente trabajar con la función de onda (2.137). De la expresión (2.105) obtenemos la función de onda normalizada

$$\phi(x, t)_N = \mathcal{N}(\phi_0(x, t) + U_0 \bar{f}(u, v, t)). \quad (2.139)$$

Con el factor de normalización y la función dados como

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(x, t) + U_0 \bar{f}(u, v, t)|^2 dx}}, \quad (2.140)$$

$$\bar{f}(u, v, t) = t f(u, v). \quad (2.141)$$

Para constante de acoplamiento, U_0 , pequeña y tiempos cortos, la norma al cuadrado de la nueva función de onda la aproximamos como

$$\begin{aligned} |\phi_N(x, t)|^2 &= |\phi_0(x, t)|^2 + 2U_0 \left\{ \text{Re} \left[\phi_0(x, t) \bar{f}^*(u, v, t) \right] \right. \\ &\quad \left. - |\phi_0(x, t)|^2 \text{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x', t) \bar{f}^*(u', v', t) dx' \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.142)$$

y su normalización como

$$\mathcal{N} = 1 - U_0 \text{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x', t) \bar{f}^*(u', v', t) dx' \right], \quad (2.143)$$

donde hemos considerado que $u' = \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(-x' - \frac{L}{2}\right)$, $v' = \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left(x' - \frac{L}{2}\right)$, y $\phi_0(x, t) \approx \phi_0(x, 0)$ para tiempos cortos, de tal manera que $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(x, t)|^2 dx = 1$.

2.2.3 Corrección del tiempo de enfocamiento para la onda a tiempos cortos

Por otro lado, para el cálculo del tiempo de enfocamiento o máximo, \bar{t} , de $|\phi_N(x, t)|^2$ respecto al tiempo de enfocamiento, t^* , de $|\phi_0(x, t)|^2$, vamos a concentrarnos en el eje óptico,

$x = 0$, ya que debido a la simetría del problema respecto de este eje, esperamos que la máxima concentración de la onda se ubique sobre éste, por lo que es conveniente considerar las siguientes expresiones

$$|\phi_N(0, t)|^2 = G(t) + 2U_0(q_1(t) - q_2(t)), \quad (2.144)$$

$$G(t) = |\phi_0(0, t)|^2, \quad (2.145)$$

$$q_1(t) = \text{Re} [\phi_0(0, t) \bar{f}^*(u, v, t)|_{x=0}], \quad (2.146)$$

$$q_2(t) = |\phi_0(0, t)|^2 \text{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x', t) \bar{f}^*(u', v', t) dx' \right]. \quad (2.147)$$

Fácilmente, encontramos el nuevo tiempo de enfocamiento y su correspondiente corrimiento del tiempo, respectivamente como

$$\bar{t} = t^* + \delta, \quad (2.148)$$

$$\delta = -2U_0 \frac{(q'_1(t^*) - q'_2(t^*))}{G''(t^*)}, \quad (2.149)$$

donde los signos primados indican la primera y segunda derivada de la función respecto de t y con la evaluación en t^* . Además, hemos considerado que

$$G'(t^*) = \left\{ \frac{d}{dt} |\phi_0(0, t)|^2 \right\} |_{t=t^*} = 0. \quad (2.150)$$

De las expresiones (2.104), (2.106), (2.136) y (2.141) obtuvimos

$$\begin{aligned} \phi_0(x', t) \bar{f}^*(u', v', t) &\approx -\frac{i}{\hbar L^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t \left[1 - \Theta(-x' - \frac{L}{2}) - \Theta(x' - \frac{L}{2}) \right] \times \\ &\times \left\{ e^{-i\frac{m}{4\hbar t}(-x' - \frac{L}{2})^2} D_{-3} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| -x' - \frac{L}{2} \right| \right] \text{sgn}(-x' - \frac{L}{2}) \right. \\ &\left. + e^{-i\frac{m}{4\hbar t}(x' - \frac{L}{2})^2} D_{-3} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| x' - \frac{L}{2} \right| \right] \text{sgn}(x' - \frac{L}{2}) \right\}, \end{aligned} \quad (2.151)$$

La aproximación $\phi_0(x', t) \approx \phi_0(x', 0)$ fue motivada para insertarla en la integral que está en (2.143) y (2.147), de tal manera que los límites de integración cambian de $-\frac{L}{2}$ a $\frac{L}{2}$. Realizamos algunos cambios de variable que nos permitió aplicar nuevamente el caso de tiempos cortos en los nuevos límites de la integral. Luego, aplicamos la fórmula 7.722-2 de [21], $(\int_0^\infty e^{-\frac{1}{4}x^2} x^{\mu-1} D_{-\nu}(x) dx = \frac{\sqrt{\pi} 2^{-\frac{1}{2}\mu - \frac{1}{2}\nu} \Gamma(\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2})})$ con $\text{Re}(\mu) > 0$). Obtuvimos

$$\text{Re} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi_0(x', t) \bar{f}^*(u', v', t) dx' \right] = \frac{2}{3L^2} \frac{t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi m \hbar}}. \quad (2.152)$$

Además,

$$\phi_0(0, t) \bar{f}^*(u, v, t)|_{x=0} = \frac{2i}{\hbar L^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{-\frac{imL^2}{16\hbar t}} \operatorname{erf} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] D_{-3} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \frac{L}{2} \right], \quad (2.153)$$

$$|\phi_0(0, t)|^2 = \frac{1}{L} \operatorname{erf} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] \operatorname{erf} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right]. \quad (2.154)$$

De tal manera que

$$G(t) = \frac{1}{L} \operatorname{erf} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] \operatorname{erf} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right], \quad (2.155)$$

$$q_1(t) = \operatorname{Re} \left[\frac{2i}{\hbar L^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{-\frac{imL^2}{16\hbar t}} \operatorname{erf} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] D_{-3} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \frac{L}{2} \right] \right], \quad (2.156)$$

$$q_2(t) = \frac{1}{L} \operatorname{erf} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] \operatorname{erf} \left[e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \frac{L}{2} \right] \frac{2}{3L^2} \frac{t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi m \hbar}}, \quad (2.157)$$

$$\mathcal{N} = 1 - \frac{2U_0}{3L^2} \frac{t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi m \hbar}}. \quad (2.158)$$

En [13] encontramos el tiempo de enfocamiento para el problema lineal o el tiempo de máximo valor para densidad de onda. Éste es el último máximo de las funciones de Fresnel y se puede estimar usando la espiral de Cornu, pero es un número irracional, ya que resuelve una ecuación trascendental. El valor de esta constante es

$$t^* = (0.0544084) L^2 \frac{m}{\hbar}, \quad (2.159)$$

la cual satisface la ec. (2.150), es decir, el tiempo de enfocamiento o máxima concentración del haz de bosones que resuelven la ecuación lineal de Schrödinger sin potencial externo, dicha cantidad es reconocida por nuestro grupo de trabajo como la constante de Case. Realizamos las derivadas de las funciones (2.155)-(2.157) y evaluamos en la constante de Case, t^* , para obtener

$$q_1'(t^*) = \frac{0.0154655}{\hbar L^2}, \quad (2.160)$$

$$q_2'(t^*) = \frac{0.237068}{\hbar L^2}, \quad (2.161)$$

$$G''(t^*) = (-1287.47) \frac{\hbar}{m} \frac{1}{L^5}. \quad (2.162)$$

Sustituyendo estos últimos resultados en las expresiones en (2.149), obtenemos el gran resultado

$$\delta = -(3.442 \times 10^{-4}) \frac{U_0 L^3 m}{\hbar^2}, \quad (2.163)$$

$$\bar{t} = t^* - (3.442 \times 10^{-4}) \frac{U_0 L^3 m}{\hbar^2}. \quad (2.164)$$

Finalmente, la función de onda normalizada para tiempos cortos y las coordenadas del punto de enfocamiento son

$$\begin{aligned} \phi_N(x, t) = & \left\{ 1 - \frac{2U_0}{3L^2} \frac{t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi m \hbar}} \right\} \left[\frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(-x - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \right. \\ & + \frac{2i U_0}{L \hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{i\frac{m}{4\hbar t} \left(-x - \frac{L}{2} \right)^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| -x - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(-x - \frac{L}{2} \right) \left. \right\} \\ & + \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \\ & \left. \left. + \frac{2i U_0}{L \hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{i\frac{m}{4\hbar t} \left(x - \frac{L}{2} \right)^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| x - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right\} \right], \quad (2.165) \end{aligned}$$

$$\vec{f}'_o = \left(\bar{x} = 0, \bar{t} = t^* - (3.442 \times 10^{-4}) \frac{U_0 L^3 m}{\hbar^2} \right), \quad (2.166)$$

para la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} [1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$.

Mientras que para la condición inicial $\phi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} [1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$, basta aplicar la transformación galileana a los resultados anteriores para obtener la nueva función de onda normalizada y la nueva posición del punto de enfocamiento,

$$\begin{aligned} \phi_{NG}(x, t) = & \left\{ 1 - \frac{2U_0}{3L^2} \frac{t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi m \hbar}} \right\} \left[\frac{1}{2\sqrt{L}} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(-\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \right. \\ & + \frac{2i U_0}{L \hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{i\frac{m}{4\hbar t} \left(-\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right)^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| -\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(-\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right) \left. \right\} \\ & + \frac{1}{2\sqrt{L}} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{2\hbar t}} \left(\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \\ & \left. \left. + \frac{2i U_0}{L \hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t e^{i\frac{m}{4\hbar t} \left(\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right)^2} D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} \left| \left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(\left(x - \frac{\hbar k}{m} t \right) - \frac{L}{2} \right) \right\} \right], \quad (2.167) \end{aligned}$$

$$\vec{f}'_o = \left(\bar{x}' = \frac{\hbar k}{m} \left(t^* - (3.442 \times 10^{-4}) \frac{U_0 L^3 m}{\hbar^2} \right), \bar{t}' = t^* - (3.442 \times 10^{-4}) \frac{U_0 L^3 m}{\hbar^2} \right). \quad (2.168)$$

Además, tenemos las siguientes observaciones, dado que $\frac{mL^2}{\hbar} > 0$ y $\frac{L}{\hbar} > 0$ entonces,

- Si $U_0 < 0$, $\bar{t} > t^*$, es más grande el tiempo de enfocamiento.
- Si $U_0 = 0$, $\bar{t} = t^*$, se tiene el tiempo de enfocamiento de la onda para el caso lineal.

- Si $U_0 > 0$, $\bar{t} < t^*$, es más pequeño el tiempo de enfocamiento.

Estas observaciones se aprecian en el esquema mostrado en la figura 2.2. Para el caso de acoplamiento negativo, color rojo, el tiempo de enfocamiento es más grande y para el caso de acoplamiento positivo, color azul, el enfocamiento es más pequeño, ambos respecto al caso de acoplamiento nulo, color verde.

Adicionalmente, dada la simetría del problema con $k = 0$, observamos en la figura 2.3 que el punto de enfocamiento se encuentra sobre el eje temporal u óptico, con un desplazamiento hacia arriba para $U_0 < 0$ y un desplazamiento hacia abajo para $U_0 > 0$ que se observa con respecto al tiempo de enfocamiento para el caso $U_0 = 0$, indicado por la línea oscura. En esta última figura consideramos a $\phi_N(y, \tau)$, con $y = \sqrt{m/\hbar}x$, $\tau = t$ y $m = 1 = \hbar$.

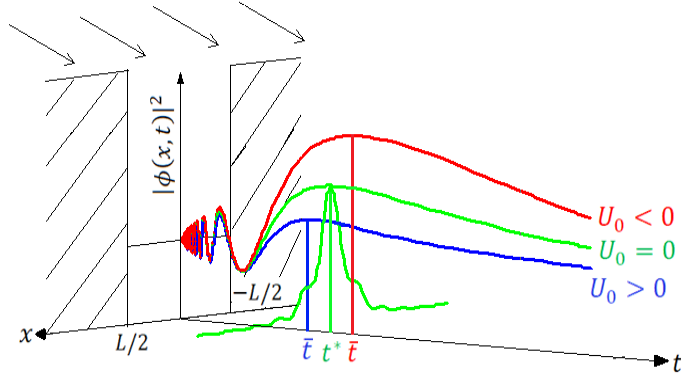


Figura 2.2: Tiempo de enfocamiento como función de la constante de acoplamiento U_0 .

2.2.4 Solución en el régimen de tiempos largos

Nuevamente recurrimos al esquema general del tipo

$$\frac{d^2}{dx^2} \vec{V}(x) + \mathbf{H} \vec{V}(x) = \vec{S}(x), \quad (2.169)$$

visto en secciones anteriores.

Como mencionamos en la última sección correspondiente a la solución del obturador a tiempos largos, consideramos la función de Green en (2.84) y la condición inicial de la rendija difractiva $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} [1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$.

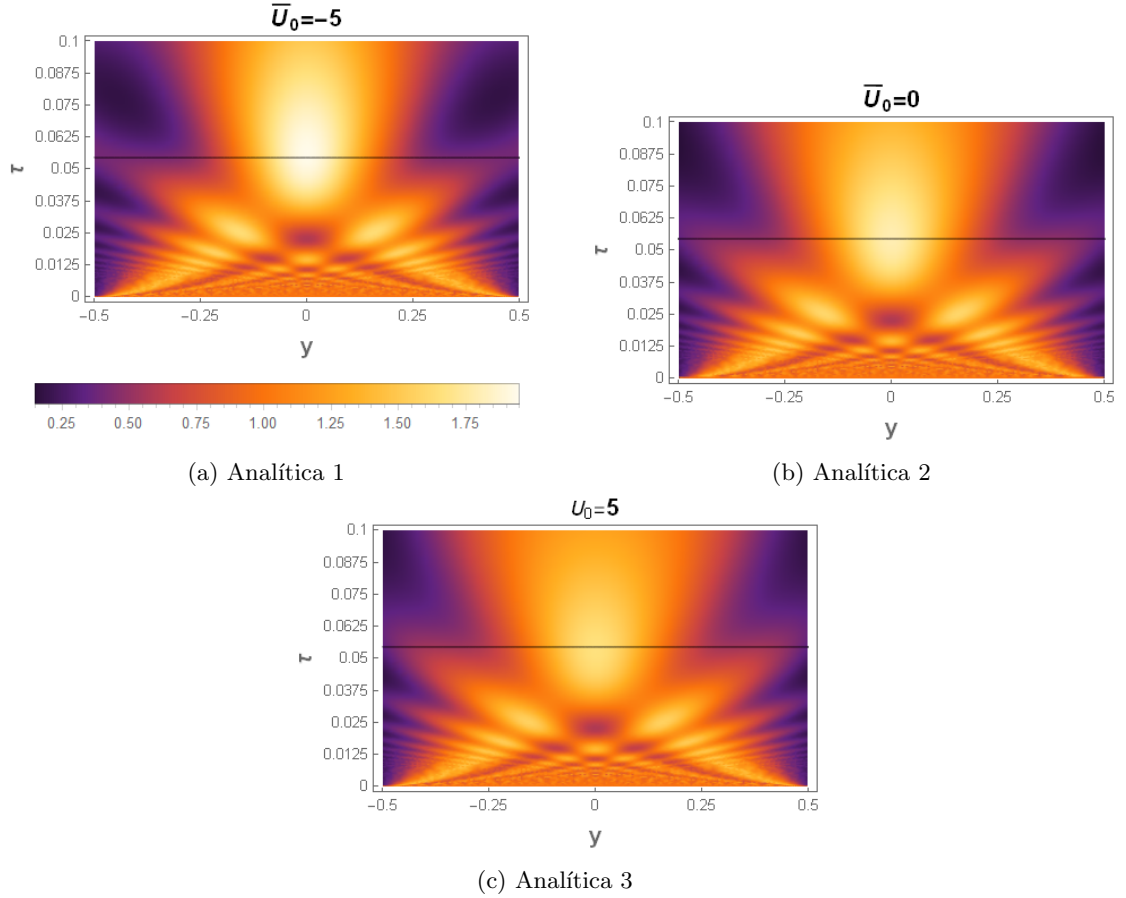


Figura 2.3: Solución analítica para el caso de la rendija. Gráfica de densidad de la función $|\phi_N(y, \tau)|^2$, correspondiente al valor de la constante de acoplamiento (a) $\bar{U}_0 = -5$, (b) $\bar{U}_0 = 0$ y (c) $\bar{U}_0 = 5$. Conforme \bar{U}_0 crece, el tiempo de enfocamiento tiende a disminuir. La línea negra corresponde a t^* para el caso lineal donde $\bar{U}_0 = 0$. Usamos la misma escala del termómetro de color por la misma razón expuesta para el caso del obturador.

La función de onda que resuelve el problema lineal, ecuación de Schrödinger libre en 1D sin potencial externo, es

$$\phi_0(x, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t L}} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}} dx' = \frac{1}{\sqrt{i\pi L}} \int_{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}(x-\frac{L}{2})}}^{\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}(x+\frac{L}{2})}} e^{i\xi^2} d\xi. \quad (2.170)$$

Similarmente al caso del obturador, dado que estamos trabajando con tiempos largos y considerando que x es finita, entonces $\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}(x-\frac{L}{2})}$ y $\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}(x+\frac{L}{2})}$ son cercanas a cero, de tal manera que el argumento de la función exponencial compleja, ξ , es pequeño. Usando nuevamente la serie de esta función exponencial, en este caso obtenemos la siguiente serie

convergente

$$\phi_0(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{t^{n+1/2}}, \quad (2.171)$$

donde para los valores de $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ se tiene,

$$A_n(x) = -\frac{i^{n-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi L}(2n+1)n!} \left(\frac{m}{2\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}} \left[\left(-x - \frac{L}{2}\right)^{2n+1} + \left(x - \frac{L}{2}\right)^{2n+1} \right], \quad (2.172)$$

$$A_n(x) = A_n(-x). \quad (2.173)$$

Así, la ecuación diferencial por resolver es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -U_0 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{A_n(x) A_l^*(x) A_p(x)}{t^{n+l+p+3/2}}. \quad (2.174)$$

El lado derecho de esta ecuación es una función par en x . Entonces proponemos la siguiente solución en serie

$$\psi(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k(x)}{t^{k+3/2}}, \quad (2.175)$$

la cual, también hereda las propiedades de la fuente, es decir, $B_k(x)$ es una función par en x , $B_k(x) = B_k(-x)$, para que $\psi(x, t)$ sea par respecto a x .

Además, es de suma importancia incorporar nuestra suposición inicial, de que cuando $U_0 \rightarrow 0$, $\psi(x, t) \rightarrow 0$, pero este se cumple si para todos los valores de $k = 0, 1, 2, 3, \dots$, $B_k(x, t) \rightarrow 0$. Obtenemos entonces que,

$$B_{-1}(x) = 0, \quad (2.176)$$

y para los valores de $k = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$B_k''(x) = \frac{2im}{\hbar} \left(k + \frac{1}{2}\right) B_{k-1}(x) + \frac{2mU_0}{\hbar^2} \sum_{\substack{p+n \leq k \\ p=0,1,2,\dots \\ n=0,1,2,\dots}} A_{k-p-n}^*(x) A_p(x) A_n(x). \quad (2.177)$$

Tomando en cuenta las propiedades que deben cumplir las funciones $B_k(x)$, calculamos las funciones para los primeros órdenes en t y obtenemos

$$B_0(x) = \frac{mU_0}{\hbar^2} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}x^2}, \quad (2.178)$$

$$B_1(x) = \frac{m^2U_0}{12\hbar^3} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} \left(4x^4 + \frac{L^2x^2}{2}\right), \quad (2.179)$$

$$B_2(x) = \frac{m^3U_0}{12\hbar^4} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(-\frac{23}{30}x^6 - \frac{1}{2}L^2x^4 - \frac{17}{480}L^4x^2\right), \quad (2.180)$$

etc.

A primeras potencias en t , la función corrección tiene la forma

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = U_0 \left[\frac{1}{t^{3/2}} \frac{m}{\hbar^2} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x^2 + \frac{1}{t^{5/2}} \frac{m^2}{12\hbar^3} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} \left(4x^4 + \frac{L^2 x^2}{2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{t^{7/2}} \frac{m^3}{12\hbar^4} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(-\frac{23}{30} x^6 - \frac{1}{2} L^2 x^4 - \frac{17}{480} L^4 x^2 \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.181)$$

Mientras que la función de onda total en el régimen de tiempos largos es,

$$\begin{aligned} \phi(x, t) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^{n-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi L(2n+1)n!}} \left(\frac{m}{2\hbar} \right)^{n+\frac{1}{2}} \left[\left(-x - \frac{L}{2} \right)^{2n+1} + \left(x - \frac{L}{2} \right)^{2n+1} \right] \frac{1}{t^{n+1/2}} \\ + U_0 \left[\frac{1}{t^{3/2}} \frac{m}{\hbar^2} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} x^2 + \frac{1}{t^{5/2}} \frac{m^2}{12\hbar^3} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} \left(4x^4 + \frac{L^2 x^2}{2} \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{t^{7/2}} \frac{m^3}{12\hbar^4} \left(\frac{mL}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(-\frac{23}{30} x^6 - \frac{1}{2} L^2 x^4 - \frac{17}{480} L^4 x^2 \right) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (2.182)$$

Para el caso de la condición inicial $\phi_0(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik} [1 - \Theta(-x - \frac{L}{2}) - \Theta(x - \frac{L}{2})]$, solo basta aplicar una transformación galileana.

En conclusión, a partir de la expresión (2.182), observamos que la primera serie, debido a la solución del problema de difracción lineal, tiene una velocidad de decaimiento que es proporcional a $t^{-1/2}$. Mientras que la serie debido a la parte no lineal de G-P, contiene términos que caen más rápido que $t^{-1/2}$ para tiempos largos.

Capítulo 3

Solución numérica para la ecuación diferencial de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo y presentación de resultados

En esta parte presentamos un algoritmo básico de la solución numérica de la ecuación de Gross-Pitaevskii en una dimensión, la cual es útil para abordar tanto el problema del obturador como la rendija, ambas consideradas como condiciones iniciales, usando intervalos pequeños en la coordenada temporal. La finalidad de esta solución alternativa es comprobar los resultados encontrados analíticamente. Dadas las desventajas a las que nos enfrentamos en el tiempo de cálculo computacional, sólo abordamos intervalos pequeños en el tiempo después de que comienza a evolucionar la función de onda a partir de su condición inicial.

3.1 Solución numérica para la ecuación de Gross-Pitaevskii dependiente del tiempo

Para esta solución consideramos los cambios de variable $\tau = t$, $y = \sqrt{\frac{m}{\hbar}}x$ y $\bar{U}_0 = \frac{U_0}{\hbar}$ en la ecuación diferencial (2.11), y obtenemos la ecuación diferencial, la cual corresponde a

una ecuación en variables naturales cuando $\hbar = 1 = m$, de la forma

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(y, \tau)}{\partial y^2} + \bar{U}_0 |\phi(y, \tau)|^2 \phi(y, \tau) = i \frac{\partial \phi(y, \tau)}{\partial \tau}. \quad (3.1)$$

Los rangos de interés para encontrar la solución son: $y \in [y_{\min}, y_{\max}]$ y $\tau \in [0, \tau_{\max}]$.

Primero discretizamos el intervalo $[y_{\min}, y_{\max}]$ en s segmentos de longitud $\Delta y = \frac{y_{\max} - y_{\min}}{s}$, y mediante diferencias finitas, aproximamos la segunda derivada parcial respecto a y . Obtenemos así un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma

$$\frac{d\phi_i(\tau)}{d\tau} = -i \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{i+1}(\tau) - 2\phi_i(\tau) + \phi_{i-1}(\tau)}{(\Delta y)^2} \right] + \bar{U}_0 |\phi_i(\tau)|^2 \phi_i(\tau) \right\}, \quad (3.2)$$

donde

$$\begin{aligned} i &\in \{1, 2, 3, \dots, s+1\}, \\ \phi_i(\tau) &= \phi(y_{\min} + (i-1)\Delta y, \tau). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Dados los inconvenientes en el tiempo de cálculo numérico para el software, elegimos las condiciones de frontera periódicas por su ventaja al trabajar con grandes rangos en las variables y y τ , de tal manera que

$$\begin{aligned} \phi_0(\tau) &= \phi(y_{\max}, \tau) = \phi_{s+1}(\tau), \\ \phi_{s+2}(\tau) &= \phi(y_{\min}, \tau) = \phi_1(\tau). \end{aligned} \quad (3.4)$$

En notación vectorial tenemos

$$\frac{d}{d\tau} \vec{\phi}(\tau) = \vec{f}(\tau, \vec{\phi}(\tau)), \quad (3.5)$$

donde

$$\vec{\phi}(\tau) = \begin{pmatrix} \phi_1(\tau) \\ \phi_2(\tau) \\ \vdots \\ \phi_{s+1}(\tau) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned}
 \vec{f}(\tau, \vec{\phi}(\tau)) = -i \left\{ -\frac{1}{2(\Delta y)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \right. \\
 \left. + \bar{U}_0 \begin{pmatrix} |\phi_1(\tau)|^2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |\phi_2(\tau)|^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |\phi_3(\tau)|^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & |\phi_s(\tau)|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & |\phi_{s+1}(\tau)|^2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \phi_1(\tau) \\ \phi_2(\tau) \\ \vdots \\ \phi_{s+1}(\tau) \end{pmatrix}. \tag{3.7}
 \end{aligned}$$

Además, si $\phi(y, 0)$ es la condición inicial para cada problema respectivo, entonces el vector condición inicial para el sistema es

$$\vec{\phi}(0) = \begin{pmatrix} \phi_1(0) \\ \phi_2(0) \\ \vdots \\ \phi_{s+1}(0) \end{pmatrix}, \tag{3.8}$$

con

$$\begin{aligned}
 \phi_i(0) &= \phi(y_{\min} + (i - 1)\Delta y, 0), \\
 i &\in \{1, 2, 3, \dots, s + 1\}.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Ahora, aplicamos el método Runge-Kutta vectorial clásico de cuarto orden. Para esto, discretizamos el intervalo $[0, \tau_{\max}]$ en v segmentos de longitud $\Delta\tau = \frac{\tau_{\max}}{v}$, de tal

manera que la solución numérica la obtenemos como,

$$\tau_{\min} = 0, \quad (3.10)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, v, \quad (3.11)$$

$$\vec{\phi}(n\Delta\tau) = \vec{\phi}_n, \quad (3.12)$$

$$\vec{\phi}_{n+1} = \vec{\phi}_n + \frac{1}{6}\Delta\tau \left(\vec{K}_1 + 2\vec{K}_2 + 2\vec{K}_3 + \vec{K}_4 \right), \quad (3.13)$$

$$\vec{K}_1 = \vec{f}(\tau_n, \vec{\phi}_n), \quad (3.14)$$

$$\vec{K}_2 = \vec{f}\left(\tau_n + \frac{1}{2}\Delta\tau, \vec{\phi}_n + \frac{1}{2}\Delta\tau\vec{K}_1\right), \quad (3.15)$$

$$\vec{K}_3 = \vec{f}\left(\tau_n + \frac{1}{2}\Delta\tau, \vec{\phi}_n + \frac{1}{2}\Delta\tau\vec{K}_2\right), \quad (3.16)$$

$$\vec{K}_4 = \vec{f}\left(\tau_n + \Delta\tau, \vec{\phi}_n + \Delta\tau\vec{K}_3\right), \quad (3.17)$$

$$(3.18)$$

donde cada vector calculado, correspondiente a $i = 0, 1, 2, \dots, v$, es de la forma

$$\vec{\phi}_n = \begin{pmatrix} \phi(y_{\min}, n\Delta\tau) \\ \phi(y_{\min} + (2-1)\Delta y, n\Delta\tau) \\ \vdots \\ \phi(y_{\min} + (s-1)\Delta y, n\Delta\tau) \\ \phi(y_{\max}, n\Delta\tau) \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

el cual nos da el conjunto de los valores numéricos

$$\{\phi(y_{\min} + (i-1)\Delta y, n\Delta\tau) : i \in \{1, 2, \dots, s+1\}, n \in \{0, 1, 2, \dots, v\}\}. \quad (3.20)$$

La implementación del método y la obtención de resultados se puede hacer en FORTRAN u otros lenguajes de programación. En este trabajo se recurrió, por comodidad, al software Wolfram Mathematica 12.0.

Las propiedades de cada problema con su respectiva condición inicial se enuncian a continuación.

3.1.1 Condiciones para el problema del obturador

El intervalo de interés en la coordenada y es $[y_{\min} = -70, y_{\max} = 50]$ con $s = 12000$ subintervalos de tamaño $\Delta y = 10^{-2}$. Mientras que en la coordenada τ , el intervalo es $[0, \tau_{\max} = 0.5]$ con $v = 4000$ subintervalos de tamaño $\Delta\tau = 1.25 \times 10^{-4}$.

Dado que el obturador puede ser considerado como parte de una rendija de difracción de ancho infinito y condiserando el tiempo de cálculo numérico, para fines de visualización, tomamos la condición inicial,

$$\phi(y, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \begin{cases} 0, & \text{si } y < -30 \\ 1, & \text{si } -30 \leq y \leq 0 \\ 0, & \text{si } y > 0, \end{cases} \quad (3.21)$$

es decir, hacemos uso de una ventana auxiliar de ancho grande y nos centramos en obtener los resultados gráficos para su visualización en un rango menor a la mitad del ancho de dicha ventana con respecto a la coordenada y , alrededor de la pared del obturador. Así, las regiones de interés para visualizar nuestros resultados y compararlos con el caso analítico son $y \in [-4, 4]$ y $\tau \in [0, 0.5]$.

Además, es importante recalcar que dada la aproximación de acoplamiento pequeño en el caso analítico y con el fin de comparar con las soluciones numéricas, encontramos que los valores que nos permiten una mejor visualización gráfica y no se alejan demasiado (de forma cualitativa) de la aproximación analítica son $\bar{U}_0 = -10, 0, 10$. Dichos gráficos son presentados en la siguiente sección de este capítulo.

3.1.2 Condiciones para el problema de la rendija de difracción

En este caso la región de interés para la coordenada y es $[y_{\min} = -10, y_{\max} = 10]$ con $s = 8000$ segmentos de tamaño $\Delta y = 2.5 \times 10^{-3}$. Mientras que en la coordenada τ el intervalo es $[0, \tau_{\max} = 0.1]$ con $v = 20000$ subintervalos de tamaño $\Delta\tau = 5 \times 10^{-6}$ para el conjunto de valores de $\bar{U}_0 = -5, 0, 5$. En el caso del conjunto de valores de $\bar{U}_0 = -10, 0, 10$, para la coordenada τ el intervalo de interés es $[0, \tau_{\max} = 0.135]$ con $v = 27000$ subintervalos de tamaño $\Delta\tau = 5 \times 10^{-6}$.

En ambos conjuntos consideramos a $L = 1$ y la condición inicial

$$\phi(y, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \begin{cases} 0, & \text{si } y < -0.5 \cdot L \\ 1, & \text{si } -0.5 \cdot L \leq y \leq 0.5 \cdot L \\ 0, & \text{si } y > 0.5 \cdot L \end{cases} = \frac{1}{\sqrt{L}} \left\{ 1 - \Theta\left(-y - \frac{L}{2}\right) - \Theta\left(y - \frac{L}{2}\right) \right\}. \quad (3.22)$$

Las regiones de interés para visualizar nuestros resultados y compararlos con el caso analítico son $y \in [-0.5 \cdot L, 0.5 \cdot L]$ y $\tau \in [0, 0.1]$ para el conjunto de valores de $\bar{U}_0 = -5, 0, 5$,

mientras que $\tau \in [0, 0.135]$ para el conjunto de valores $\bar{U}_0 = -10, 0, 10$. Dichos gráficos serán presentados en la siguiente sección.

3.1.3 Observaciones del método numérico

Durante la construcción de este método numérico, para ambos problemas, nos dimos cuenta de las siguientes propiedades:

1. Los valores de los pasos fijos en cada coordenada, Δy y $\Delta \tau$, fueron buscados en forma independiente con ayuda de detectores automáticos de rigidez del problema, implementados en las paqueterías de Mathematica, es decir, se determinó el tamaño adecuado del paso para evitar comportamientos de oscilaciones violentas que podrían llevar a valores divergentes en la solución. Estos valores nos permiten obtener la solución con el menor tiempo de cálculo computacional sin descuidar el origen de las divergencias.
2. La elección de los límites para el intervalo de solución en la coordenada y son con el fin de tratar de evitar la aparición de ruido no deseado en las curvas de solución obtenidas a tiempos demasiado cortos debido a la presencia de fronteras ficticias, como se aprecia en la figura 3.1. La naturaleza de estas fronteras origina discontinuidades abruptas, las cuales incorporan ruido no deseado durante el proceso iterativo del método Runge-Kutta vectorial, produciendo las gráficas distorsionadas y de baja calidad. La elección de estos valores permitió eliminar estas imperfecciones y tener un tiempo de cálculo sin ser exageradamente largo para la computadora.
3. El uso de la ventana auxiliar en el problema del borde, para obtener una solución cualitativa en el caso numérico, es una alternativa rudimentaria pero muy accesible para poder corroborar que la solución analítica obtenida a tiempos cortos es la adecuada. En el caso numérico, para abordar tiempos más largos, nos enfrentamos a un tiempo de cálculo demasiado grande y ocupa mucha memoria en la computadora.
4. En el caso del problema de la rendija de difracción se presenta un conjunto de gráficos que permite una comparación clara con el caso analítico, mientras que otro conjunto nos da diferencias muy significativas entre la parte numérica y analítica, indicándonos que en el último caso debemos considerar las otras potencias en el acoplamiento o hacer consideraciones más precisas en nuestras aproximaciones.

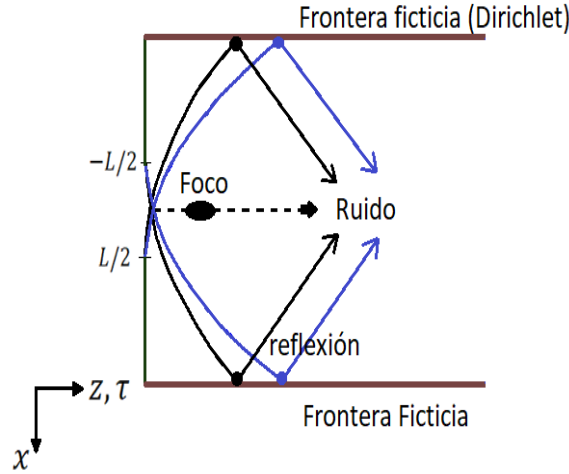


Figura 3.1: Condiciones de frontera ficticias.

3.2 Resultados obtenidos con el método analítico y numérico para tiempos cortos

Las gráficas de densidad y algunas curvas de la norma al cuadrado de la función de onda con un argumento constante se presentan en las figuras 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5. Para fines de mejor visualización usamos variables naturales $m = 1 = \hbar$. En general, en cada figura presentada en esta sección los gráficos en la columna izquierda corresponden al caso analítico, mientras que los de la columna derecha corresponde al caso numérico.

3.2.1 Obturador

Las gráficas de densidad y algunas curvas de la norma al cuadrado de la función de onda correspondientes al caso del obturador se muestran en las figuras 3.2 y 3.3. De acuerdo a las gráficas de densidad, observamos que si la constante de acoplamiento \bar{U}_0 crece, las distribuciones con mayor cantidad de bosones difractados tienden a acercarse más a la pared del borde colocada en $y = 0$. Además, la franja naranja, cercana a la pared del obturador, tiende a aumentar su ancho con el crecimiento de \bar{U}_0 .

En el caso de las gráficas a valores constantes $y = -0.05$ y $\tau = 0.25$, observamos que los desplazamientos verticales y horizontales, al comparar las de la solución analítica con la numérica, se debe a que (a) en el primer caso debemos considerar más términos de la serie para incorporar más contribución debido a la fase de la función de onda, y (b) en el

segundo caso se encuentran incorporados los errores surgidos al realizar las discretizaciones en cada intervalo de las coordenadas involucradas en la función de onda, así como de las segundas y primeras derivadas en la ecuación diferencial original.

3.2.2 Rendija de difracción

Las gráficas de densidad y algunas curvas de la norma al cuadrado de la función de onda correspondientes al caso de la rendija se muestran en las figuras 3.4 y 3.5.

De acuerdo a los mapas de densidad, se observa que si \bar{U}_0 crece, los valores máximos de la densidad de onda, los cuales corresponden al color más brillante, y con forma de un disco, tienden a desplazarse hacia abajo, es decir, el tiempo de enfocamiento tiende a disminuir. Esto demuestra que la nueva expresión obtenida, ecuación (2.164), es correcta. Cabe resaltar que la elección de una escala fija en el termómetro de colores, usado en las gráficas de densidad, tanto para el obturador como para la rendija, fue con el objetivo de visualizar el fenómeno de difracción y enfocamiento, y para darnos una descripción cualitativa de las regiones de distribución de bosones en el espacio-tiempo. Observamos que los valores máximos de la norma al cuadrado de la función de onda depende del valor del acoplamiento. Tomamos la escala entre 0 y el mayor de los máximos considerados, el caso de acoplamiento negativo.

En el caso de los contornos a $y = 0$, eje óptico, observamos nuevamente que el tiempo de enfocamiento depende del valor de \bar{U}_0 . Respecto al caso $\bar{U}_0 = 0$, el contorno correspondiente a $\bar{U}_0 < 0$ se desplaza hacia la derecha y aumenta su valor, mientras que el contorno correspondiente a $\bar{U}_0 > 0$ se desplaza hacia la izquierda y disminuye su valor. Para los contornos a $\tau = \text{cte}$ se observa una semejanza a un sombrero mexicano. Respecto al valor de $\bar{U}_0 = 0$, el valor máximo de la curva para $\bar{U}_0 > 0$ es mayor, y para $\bar{U}_0 < 0$ es menor. Además, observamos como la constante de acoplamiento influye en las distribuciones espaciales de bosones y su cambio con el tiempo.

Las diferencias entre las soluciones analíticas con las numéricas se pueden atribuir a: que en el primer conjunto necesitamos más términos de corrección que dependen del acoplamiento y el tiempo; mientras que en el segundo se reflejan los errores al hacer la discretización y aproximación de las derivadas. La solución numérica es cualitativamente buena, ya que a pesar de que ambos métodos no dan soluciones perfectas, los gráficos de éstas siguen las mismas tendencias con la variación del acoplamiento.

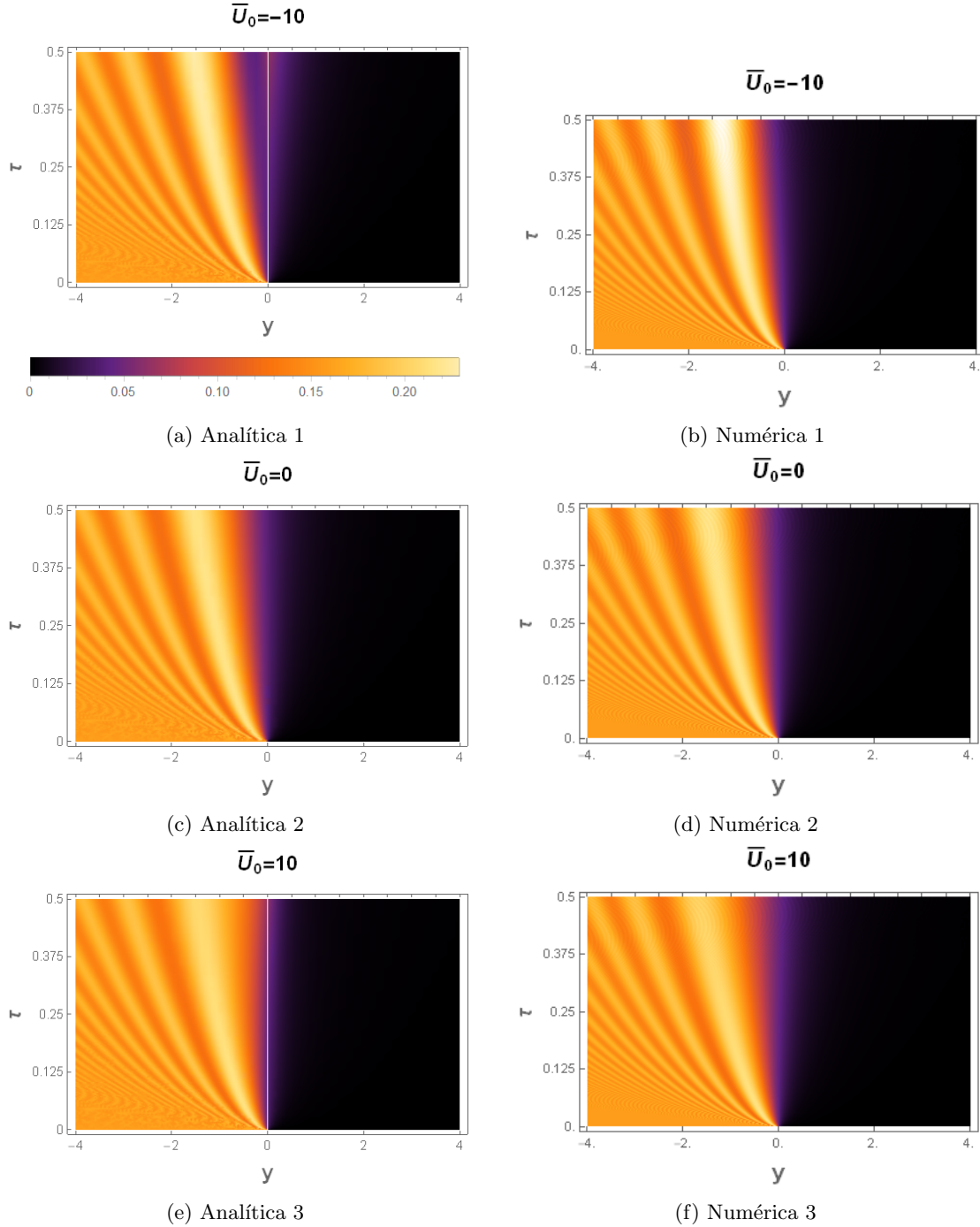


Figura 3.2: Obturador. Gráfica de densidad de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, correspondiente a diferentes valores de la constante de acoplamiento \bar{U}_0 . Las soluciones analíticas son presentadas para los casos: (a) $\bar{U}_0 = -10$, (c) $\bar{U}_0 = 0$ y (e) $\bar{U}_0 = 10$. Mientras que las soluciones numéricas son para los casos: (b) $\bar{U}_0 = -10$, (d) $\bar{U}_0 = 0$ y (f) $\bar{U}_0 = 10$. La escala del termómetro es la misma, la cual va de 0 al mayor máximo de la densidad de onda para los casos considerados.

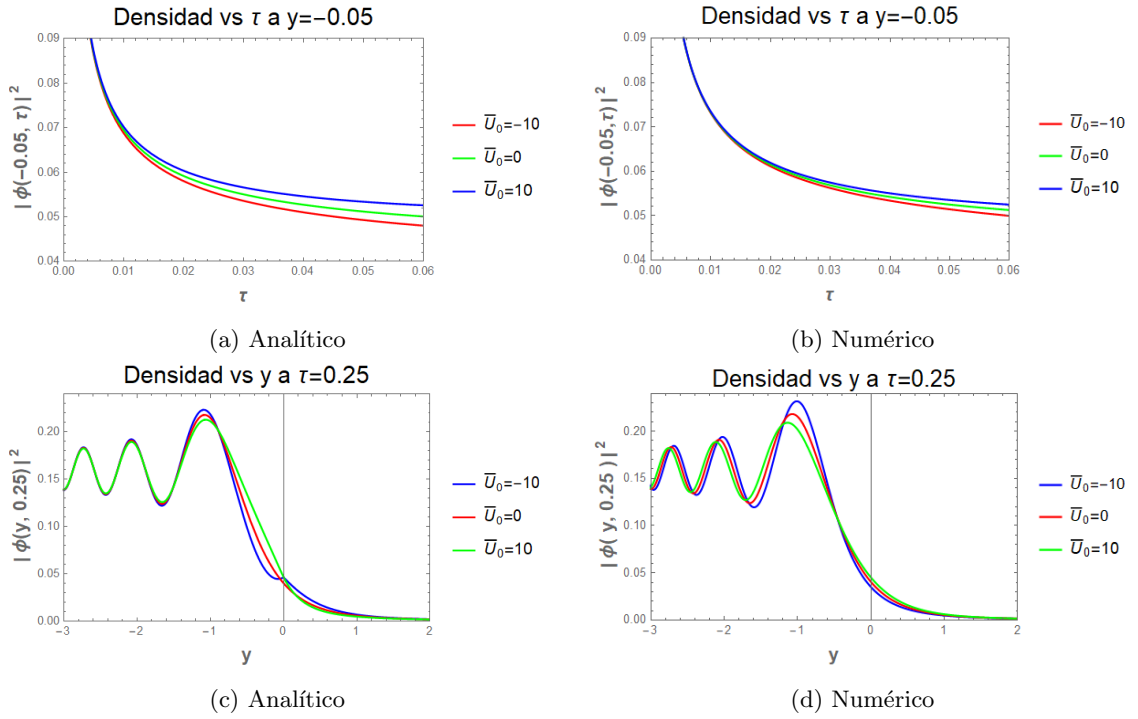


Figura 3.3: Obturador. Gráficas de densidad de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, a y constante, para la solución (a) analítica y (b) numérica; y a $\tau = 0.25$ s, para la solución (c) analítica y (d) numérica, correspondiente a los valores de la constante de acoplamiento $\bar{U}_0 = -10$, $\bar{U}_0 = 0$ y $\bar{U}_0 = 10$.

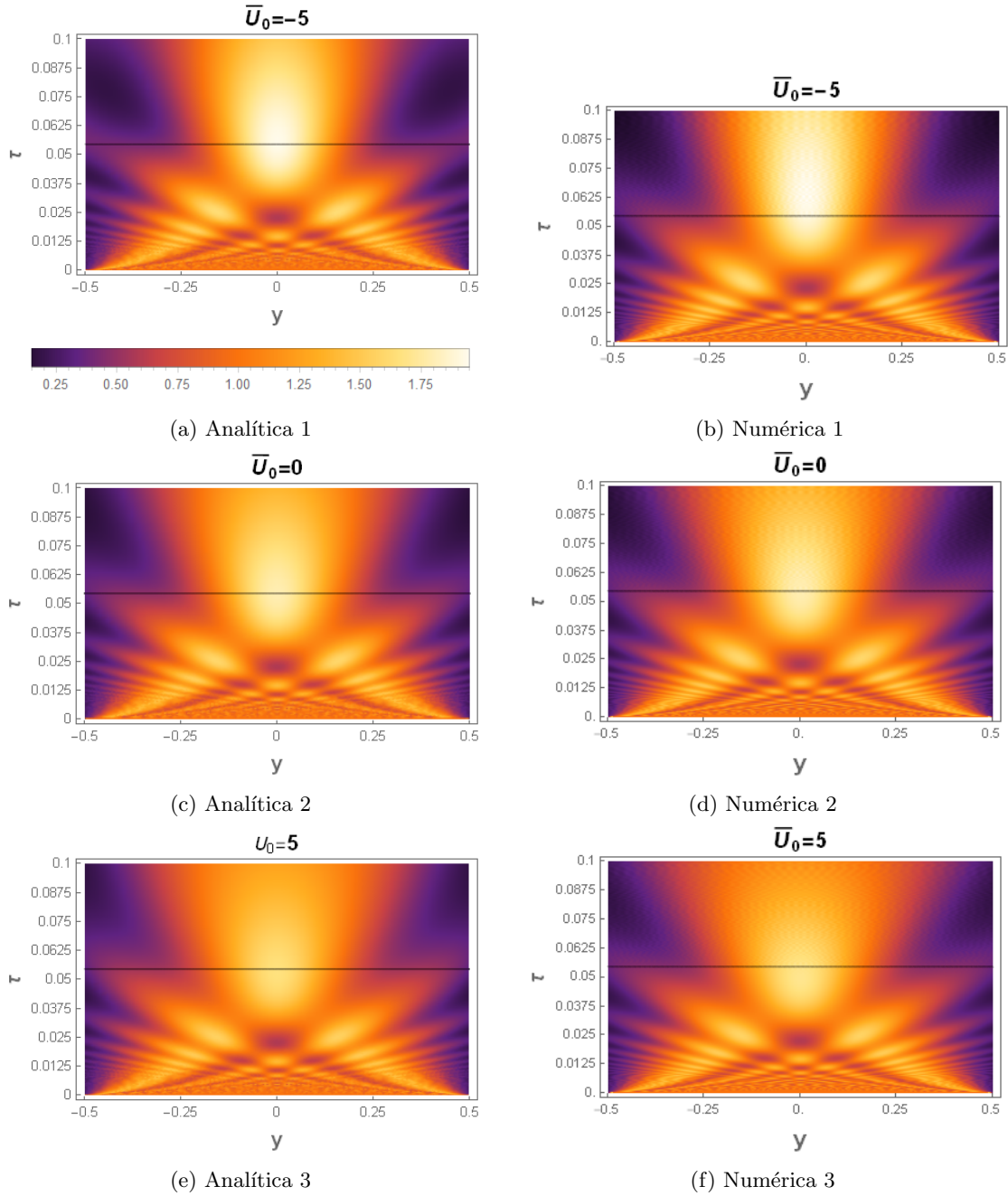


Figura 3.4: Rendija. Gráficas de densidad de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, correspondiente a diferentes valores de la constante de acoplamiento $\bar{U}_0 = \frac{U_0}{\hbar}$. Las soluciones analíticas son presentadas para los casos: (a) $\bar{U}_0 = -5$, (c) $\bar{U}_0 = 0$ y (e) $\bar{U}_0 = 5$. Mientras que las soluciones numéricas son para los casos: (b) $\bar{U}_0 = -5$, (d) $\bar{U}_0 = 0$ y (f) $\bar{U}_0 = 5$. La línea color negro corresponde al tiempo de enfocamiento para el caso $U_0 = 0$. La escala de color está entre 0 y el mayor de los máximos de la densidad de onda para los casos considerados.

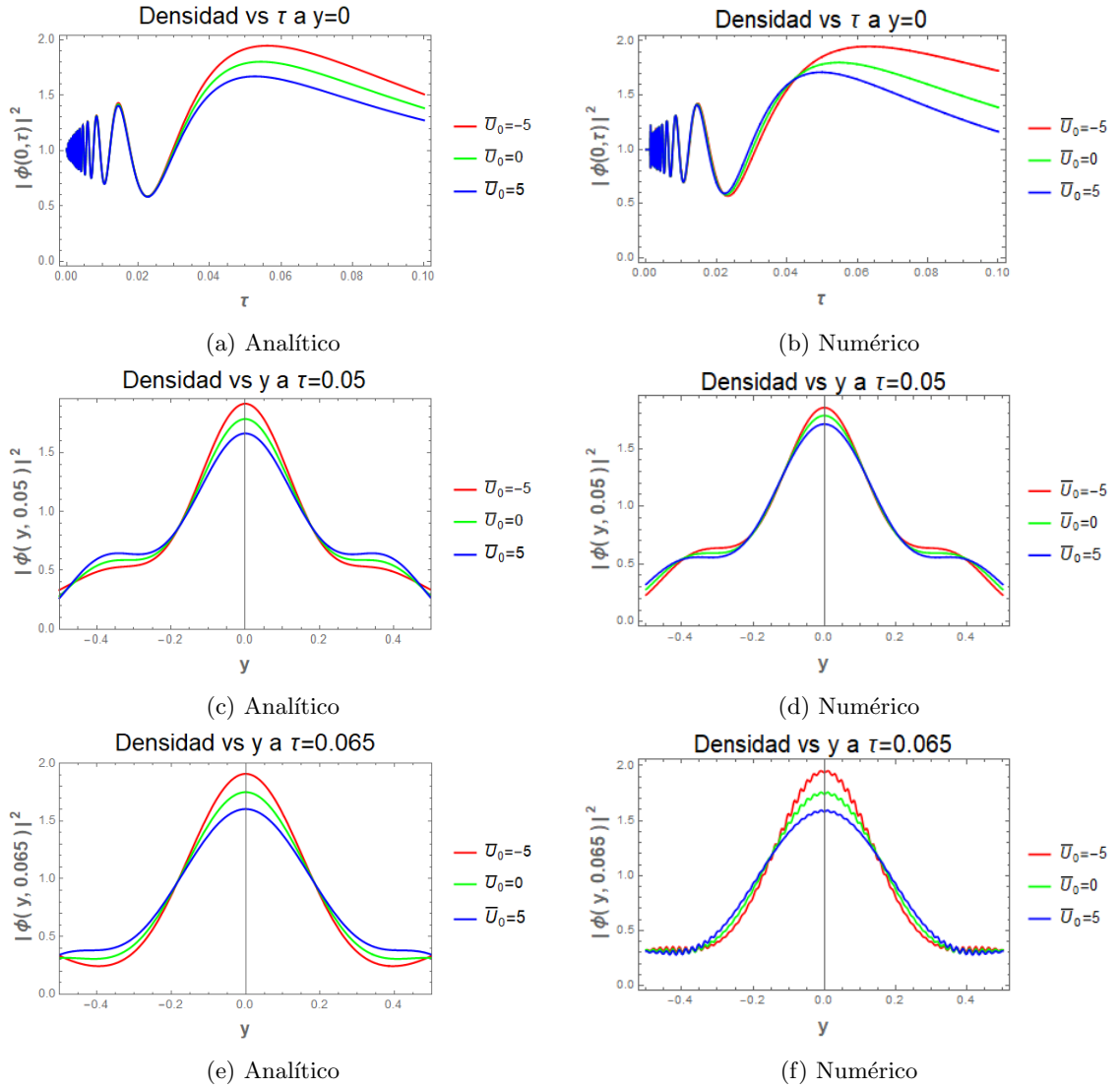


Figura 3.5: Rendija. Gráficas de densidad de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, a $y = 0$, para la solución (a) numérica y (b) analítica; a $\tau = 0.05$ s, para la solución (c) analítica y (d) numérica; y a $\tau = 0.065$ s, para la solución (e) analítica y (f) numérica, correspondiente a los valores de la constante de acoplamiento $\bar{U}_0 = -5$, $\bar{U}_0 = 0$ y $\bar{U}_0 = 5$.

3.3 Resultados numéricos para acoplamientos fuertes y su consecuencia en el fenómeno de enfocamiento

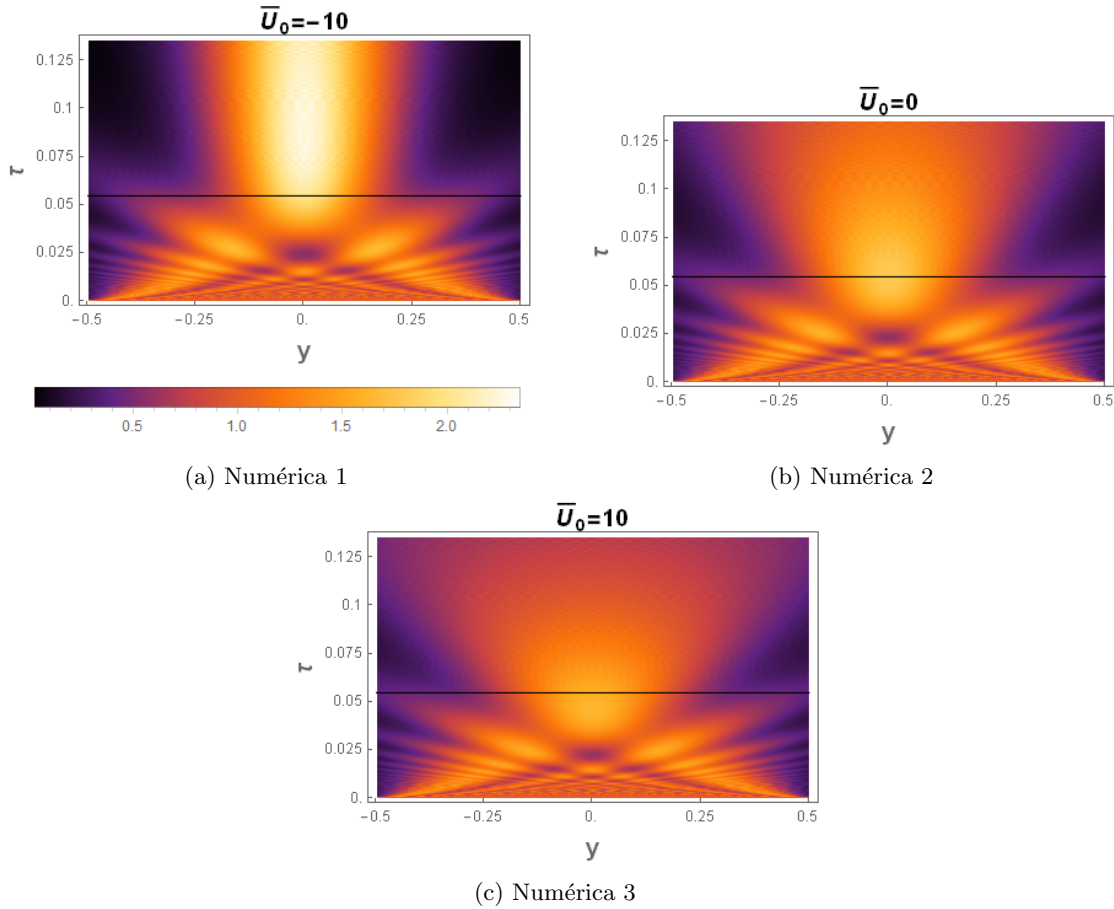


Figura 3.6: Rendija. Gráfica de densidad de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, correspondiente a los valores de la constante de acoplamiento (a) $\bar{U}_0 = -10$, (b) $\bar{U}_0 = 0$ y (c) $\bar{U}_0 = 10$. La escala de color, es fijada entre 0 y el mayor de los máximos de la densidad de probabilidad para los casos considerados.

Como se puede ver en las gráficas de densidad en la figura 3.6, para el caso de acoplamiento fuerte positivo se observa que la región de mayor densidad forma una elipse más pequeña. El fenómeno de la difracción y enfocamiento son fuertemente notables. La región con mayor número de bosones tiende a disminuir su altura y aumentar su ancho, es decir, el principio de incertidumbre es el responsable de la disipación de la anchura del paquete. Esto está de acuerdo con lo encontrado en [23].

Es importante recalcar que la difracción es la base fundamental para la relación de incertidumbre mecánico cuántica [24].

Para el caso de acoplamiento fuerte negativo, observamos que la región de mayor densidad es una elipse pero con el semi eje mayor paralelo al eje temporal. La disipación del paquete es retardada y el fenómeno de la difracción es muy débil, tal parece que hay una forma de vencer la difracción como en el caso de los haces de Bessel [24–26], aunque con otro principio diferente. Existe cierta resistencia a que el condensado se difracte y podría ser la puerta hacia otra ventana de la óptica cuántica. Sin embargo, el enfocamiento es bueno por la alta concentración alrededor del eje óptico y la anchura del pico se mantiene por más tiempo.

Estas observaciones pueden ser más evidentes considerando los contornos de la función de densidad sobre el eje óptico, los cuales se muestran en el inciso (a) de la figura 3.7. Es claro que para acoplamiento fuerte negativo, el tiempo de enfocamiento se retarda y la forma del paquete se mantiene por más tiempo. Para acoplamiento fuerte positivo, el tiempo de enfocamiento se vuelve adelantar, pero la concentración de partículas es más eficaz.

Las distribuciones espaciales a tiempos fijos son parecidas a las situaciones de acoplamientos pequeños, ver inciso (b) de figura 3.7. Sin embargo, la constante de acoplamiento es un factor muy importante en las distribuciones espaciales de los bosones. El tipo de interacción binaria, repulsión o atracción, permite que el paquete difractado se ensanche o se estreche al rededor del eje óptico, respectivamente.

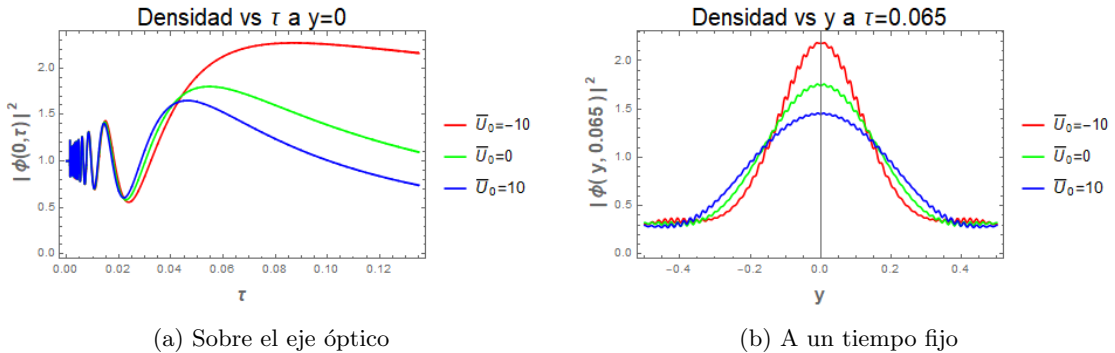


Figura 3.7: Rendija. Gráficas de contorno de la función $|\phi(y, \tau)|^2$, correspondiente a diferentes valores fuertes de la constante de acoplamiento $\bar{U}_0 = \frac{U_0}{\hbar}$, (a) sobre el eje óptico y (b) a un tiempo fijo $\tau = 0.065$ s.

En particular, estos últimos resultados no se han observado en ningún trabajo hasta el día de hoy, los cuales podrían dar lugar a futuras investigaciones.

Capítulo 4

Preparación de un condensado y problema en dos dimensiones espaciales

En este capítulo presentamos una descripción física general para poder crear un condensado de Bose-Einstein y entender cómo se prepara una condición inicial como la que se utilizó en capítulos anteriores. Además, presentamos un resultado importante que nos permite determinar el tiempo de enfocamiento del paquete en términos del campo magnético involucrado para preparar el condensado a partir de la resonancia de Feshbach.

Posteriormente, culminamos este capítulo usando los resultados obtenidos anteriormente para abordar el problema de la rendija en dos dimensiones espaciales y estacionario, mediante la aproximación paraxial.

4.1 Creación de un condensado de Bose-Einstein

El control de la interacción de dos cuerpos mediante la resonancia de Feshbach genera y controla el comportamiento de un condensado, ya que las propiedades de colisión son esenciales para este fenómeno [27].

Algunas especies ofrecen propiedades de colisión favorables para generar un condensado sin necesidad de usar la sintonización de la interacción [7]. Sin embargo, para otras especies la sintonización de Feshbach es importante para producir grandes condensados o

lograr condensados en la mayoría de las configuraciones posibles [27].

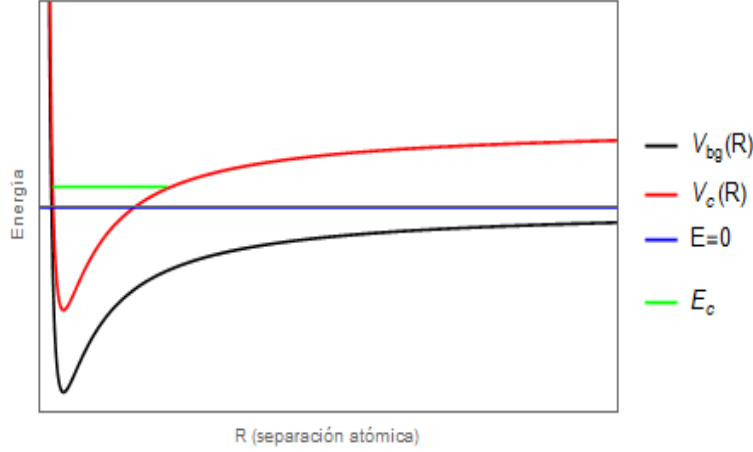


Figura 4.1: Modelo de dos canales para la resonancia de Feshbach. Los átomos colisionan a una energía relativa E en el canal abierto o de entrada, la cual está fuertemente acoplada con un estado ligado de energía E_c perteneciente a un canal cerrado. A temperaturas muy bajas se considera $E \rightarrow 0$.

En general, la producción de un condensado se realiza mediante enfriamiento evaporativo sobre un conjunto de átomos en una trampa magnética o magneto-óptica [28]. De acuerdo a la figura 4.1, al tener apagado el campo magnético, los átomos se encuentran en una curva de potencial $V_{bg}(R)$, que corresponde a la interacción entre pares de átomos y depende de la distancia entre estos, llamado canal abierto, en un estado de dispersión con energía E . Cuando el campo magnético es encendido, se crea una nueva contribución al potencial total, la cual divide los niveles originales en un conjunto de subniveles de Zeeman, los nuevos niveles son ligados o cuasi-ligados con energía E_c y el nuevo canal $V_c(R)$ es un canal cerrado. Al tener ambas curvas de potencial y el conjunto de niveles correspondientes como se muestra en el gráfico, cuando el acoplamiento de los dos canales es tomado en cuenta en el Hamiltoniano total, los dos estados se ven afectados por la interacción y la suma de ellos adquiere un factor de fase debido a la dispersión; esta fase recoge una parte resonante debido a que el estado ligado está incrustado en el continuo de dispersión.

Para ondas s y con número de onda tendiendo a cero, la longitud de dispersión total toma la forma

$$a = a_{bg} \left(1 - \frac{\Gamma_0}{E_c - E + \delta E} \right), \quad (4.1)$$

donde a_{bg} es la longitud de dispersión asociada con el potencial sin campo magnético $V_{bg}(R)$

[29], E_c es la energía del estado ligado, E es la energía del estado de dispersión, Γ_0 es el ancho de la resonancia respecto a la escala de energías, y δE es el desplazamiento de la energía hacia una nueva posición de la resonancia debido a la interacción entre los canales.

Por otro lado, si se considera la resonancia como el valor umbral, $E = 0$, y los resultados obtenidos del efecto Zeemann, tenemos

$$E_c = \Delta E = \delta\mu(B - B_c), \quad (4.2)$$

con $\delta\mu$ el momento magnético de los átomos separados menos el momento magnético del estado ligado del par de átomos, B el campo magnético a sintonizar y B_c el campo magnético que hace que el estado ligado adquiera una energía suficiente para aproximarse al cero (umbral de propagación) como en el estado de dispersión. Así, la longitud de dispersión total la escribimos como

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (4.3)$$

donde $B_0 = B_c + \delta B$ es la singularidad desplazada por una cantidad $\delta B = -\frac{\delta E}{\delta\mu}$ debido a la interacción entre el canal abierto y cerrado, y $\Delta = \frac{\Gamma_0}{\delta\mu}$ es el ancho de la resonancia en la escala del campo magnético [27].

Además, la energía del estado ligado es $E_c = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$, con a la longitud de dispersión calculada en (4.3). De tal manera, que si el campo magnético B es sintonizado al valor de la resonancia desplazada B_0 , a diverge y por lo tanto la energía del estado ligado tiende al valor umbral.

Para crear un condensado adecuado se necesita que a) a no debe ser negativa, de lo contrario el condensado colapsa cuando el número de átomos condensados excede un valor crítico relativamente pequeño [30]; b) a no debe ser muy pequeño, de otra forma la energía E_c sería grande y la colisión a alta energía impediría el enfriamiento por el mecanismo de evaporación que origina un condensado en la práctica; c) a no debe ser tan grande para evitar rápido decaimiento debido a colisiones de tres cuerpos [31]. Un buen valor de la longitud de dispersión se encuentra entre algunas decenas y centenas del radio de Bohr. En general, este valor depende de las propiedades de confinamiento de la trampa y el comportamiento del decaimiento elástico [27].

La resonancia de Feshbach es utilizada para sintonizar la longitud de dispersión al cambiarla desde valores negativos o positivos pequeños a valores positivos más grandes para evitar el colapso del condensado, o desde valores positivos grandes a otros más pequeños

para mayores densidades, originando el enfriamiento por evaporación y por lo tanto el condensado.

A partir del resultado en la ecuación (4.3) podemos escribir la constante de interacción y la posición del punto de enfocamiento para la rendija en una dimensión, considerada en los capítulos anteriores, como

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (4.4)$$

$$\vec{f}_0 = \left(0, t^* - 4.3253 \times 10^{-3} a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right) \right). \quad (4.5)$$

4.2 Preparación de la condición de una rendija

Existen varias alternativas para crear configuraciones de condensados en trampas [1, 6, 7]. Ahora hacemos una breve descripción de la configuración que consiste de dos haces perpendiculares en modos de Laguerre-Gauss (LG_0^l) que se cruzan, lo cual permite generar experimentalmente la condición inicial de nuestra rendija en una dimensión espacial vista anteriormente y otras configuraciones importantes en este trabajo.

El primer haz circularmente simétrico se propaga a lo largo de la dirección z originando una trampa en el plano xy . La trampa que involucra la otra dirección se forma por otro haz de Laguerre-Gauss en forma elíptica propagándose en la dirección x . Esta configuración evita cualquier patrón de interferencia [32].

Un modo de Laguerre-Gauss circularmente simétrico tiene un perfil de intensidad

$$I_l(\rho) = \frac{2P}{\pi\omega_0^2 l!} \left(\frac{2\rho^2}{\omega_0^2} \right)^l e^{-\frac{2\rho^2}{\omega_0^2}}, \quad (4.6)$$

el cual se propaga en la dirección z . Con $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, $p = 0$ el índice radial, l el índice azimutal u orden del modo, P la potencia y ω_0 la cintura del haz. El perfil de intensidad se muestra en la figura 4.2.

Esta intensidad crea un potencial de dipolo óptico en la aproximación de dos niveles [33], el cual permite atraer o repeler los átomos del condensado desde regiones de alta intensidad para crear ciertas configuraciones geométricas.

Para el interior de la cintura del haz, ρ pequeña respecto ω_0 , y energía térmica mucho menor que la barrera de potencial que caracteriza a la trampa, el potencial es dado

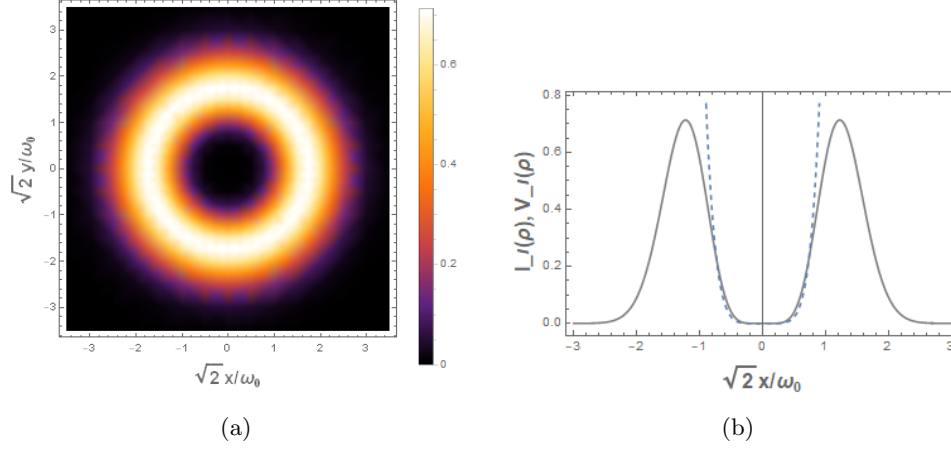


Figura 4.2: (a) Intensidad de la luz para un modo LG_0^l . (b) La línea gris es el perfil de intensidad promedio, mientras que la línea azul punteada es una variación del potencial que obedece a la ley de potencias ρ^{2l} .

como

$$V_l(\rho) \simeq \frac{2^l}{4\pi l!} \frac{\hbar \Gamma_s^2 P}{I_s \delta \omega_0^2} \left(\frac{\rho}{\omega_0} \right)^{2l}, \quad (4.7)$$

este obedece la ley de potencias pares, donde Γ_s es la tasa de emisión atómica espontánea, δ la desintonización del laser e I_s es la intensidad de saturación.

Las formas de tales potenciales de trampa junto con las densidades atómicas de Thomas-Fermi, esperadas para un gran número de ocupación del condensado para los casos $l = 1$ y $l = 6$, son mostradas en la figura 4.3.

Experimentalmente, para $l \geq 4$ el condensado es caracterizado por una densidad casi constante en toda la región de la trampa, produciendo así un paquete casi cuadrado en dos dimensiones, configuración útil para el problema abordado en la siguiente sección.

La condición inicial de una rendija en una dimensión espacial corresponde a una trampa en forma de cigarro o dedo que se obtiene al resolver la ecuación de Gross-Pitaevskii en el caso estacionario considerando un haz de Laguerre-Gauss con índice $l > 1$ a lo largo de una dirección, mientras que las otras direcciones son armónicas y más angostas que la primera. Otras configuraciones pueden ser realizadas cambiando las direcciones armónicas a aquellas que obedecen la ley de potencias pares.

Finalmente, para darle cierta energía al condensado, colocamos éste a una distancia

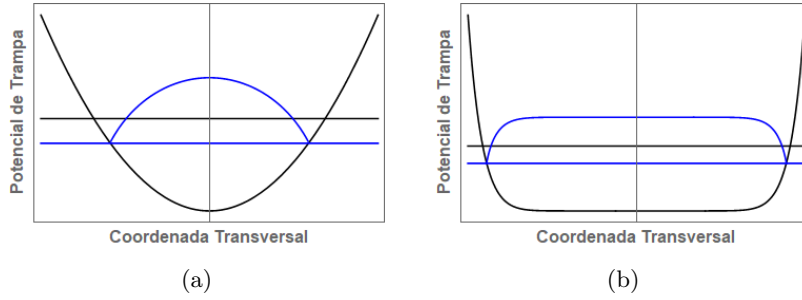


Figura 4.3: Perfil del potencial de trampa para (a) $l = 1$ y (b) $l = 6$. La curva negra corresponde al potencial. La curva azul corresponde a las densidades atómicas en la aproximación de Thomas-Fermi. La línea horizontal color negro es el potencial químico. La línea horizontal azul es inicio del paquete.

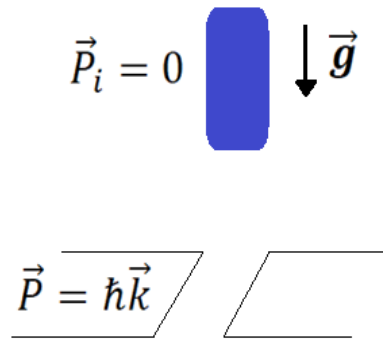


Figura 4.4: Forma para darle cierta energía de propagación al condensado en una dimensión.

arriba de la pequeña rendija. Justo cuando se apaga el potencial de trampa para formar la geometría deseada, dejamos caer el conjunto de átomos condensados por efecto de la gravedad, como se muestra en la figura 4.4, adquiriendo así un momento de centro de masa $\vec{P} = \hbar\vec{k}$ relacionado con la longitud de onda de de Broglie

$$|\vec{P}| = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}, \quad (4.8)$$

y la velocidad del centro del condensado en el límite clásico se obtiene a través de

$$\vec{P} = m\vec{v}. \quad (4.9)$$

4.3 Difracción en dos dimensiones espaciales

En esta sección abordamos el problema en dos dimensiones estacionario, donde el fenómeno difractivo es dependiente de la energía pero independiente del tiempo.

La configuración de este problema consiste de un haz de bosones propagándose en el plano xz con un vector de onda \vec{k} . Este haz entra en contacto con una rendija formada por dos paredes semi infinitas completamente absorbentes colocadas en $z = 0$, como se muestra en la figura 4.5. Estas paredes forman la configuración de una fuente dispersora. Al otro lado de las paredes se producen nuevas ondas que dan lugar al fenómeno de la difracción como en capítulos anteriores.

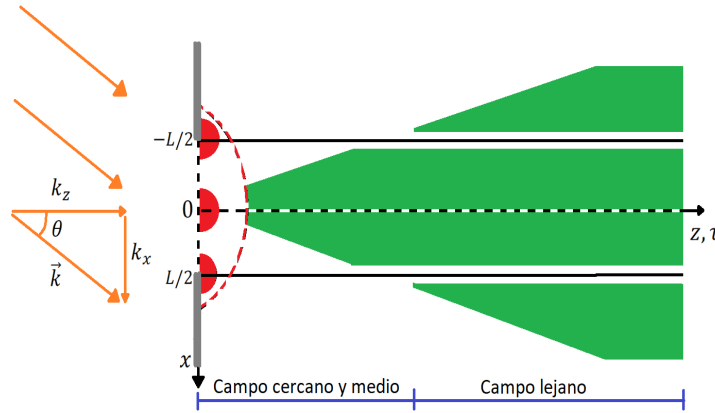


Figura 4.5: Problema en dos dimensiones. \vec{k} es el vector de onda del haz y las paredes absorbentes son las de color gris. La región blanca en el lado derecho de las paredes corresponde a los casos donde no se cumple la condición en (4.16). El semi círculo rojo más grande corresponde a la región excluida debido a que contiene la singularidad y la discontinuidad de la función de onda. La región verde corresponde a la región paraxial donde será válida la solución propuesta.

La siguiente ecuación diferencial describe la evolución del haz después de cruzar la rendija

$$i\hbar \frac{\partial \phi(x, z, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x, z, t) + U_0 |\phi(x, z, t)|^2 \phi(x, z, t). \quad (4.10)$$

Mediante la definición de la función

$$\phi(x, z, t) = e^{-\frac{i\mu t}{\hbar}} \alpha(x, z), \quad (4.11)$$

la ecuación (4.10) resulta en

$$\mu\alpha(x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \alpha(x, z) + U_0 |\alpha(x, z)|^2 \alpha(x, z). \quad (4.12)$$

Esta ecuación, al igual que la vista en los capítulos anteriores, no se puede resolver con ayuda de la función de Green como problema con condición inicial, ya que dicha ecuación es no lineal. Nuestra propuesta es considerar la función

$$\alpha(x, z) = e^{ik_z z} \xi(x, z), \quad (4.13)$$

con la condición

$$k_z \neq 0, \quad (4.14)$$

para describir una situación en la que el paquete se mueve, ya que la corriente es el gradiente de la fase. La presencia de k_z , que es el número de onda del centro de masa del condensado, afectará la ecuación diferencial para ξ , como vemos a continuación, con la ayuda de (4.12):

$$\mu\xi(x, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + 2ik_z \frac{\partial}{\partial z} - k_z^2 \right) \xi(x, z) + U_0 |\xi(x, z)|^2 \xi(x, z). \quad (4.15)$$

Ahora procedemos a la aproximación paraxial a nivel de la ecuación diferencial, considerando la condición

$$\left| \frac{\partial^2 \xi(x, z)}{\partial z^2} \right| \ll \left| -2ik_z \frac{\partial \xi(x, z)}{\partial z} + k_z^2 \xi(x, z) + \frac{2mU_0}{\hbar^2} |\xi(x, z)|^2 \right|. \quad (4.16)$$

Esta desigualdad nos permite aproximar una ecuación elíptica a una ecuación parabólica, es decir, a la ecuación de Gross-Pitaevskii en una dimensión, pero considerando una nueva variable que reemplaza el tiempo, con el objetivo de usar las soluciones analíticas que encontramos en la sección 2.2, principalmente a tiempos cortos.

Para que se cumpla esta condición necesitamos: 1) que la componente del número de onda en la dirección z , k_z , asociada con el centro de masa de cada paquete, sea grande. En el límite clásico consideramos la velocidad del centro de masa en forma aproximada como $\vec{v} = \frac{\hbar}{m} (k_x \hat{x} + k_z \hat{z})$ para la configuración mostrada en la figura 4.5, de tal manera que si k_z es grande, entonces $|\vec{v}|$ también lo es, es decir, el condensado se propaga rápidamente y logra crear patrones de enfocamiento lejos de los bordes. De lo contrario, se encontrará

enfocamiento en la región de campo medio y cercano, involucrando la singularidad en $z = 0$. 2) Evitar que $\left| \frac{\partial^2 \xi(x,z)}{\partial z^2} \right| \rightarrow \infty$ y $\left| \frac{\partial \xi(x,z)}{\partial z} \right| \rightarrow 0$. Dado que existen discontinuidades en las posiciones de los bordes de la solución (2.167), las derivadas tienen el comportamiento que se busca evitar. Así, un conjunto abierto alrededor de cada borde debe excluirse para el caso de campo cercano. Además, en esta región de campo cercano, la solución se puede escribir en términos de una serie de potencias positivas en z y al realizar las derivadas respecto a esta variable observamos que la segunda derivada crece más rápido que la primera, lo cual no queremos. En la región de campo lejano, la función de onda depende de las potencias inversas en z , de tal manera que $\frac{\partial^2 \xi(x,z)}{\partial z^2}$ tiende a cero más rápido que $\frac{\partial \xi(x,z)}{\partial z}$. 3) Que la densidad $|\xi(x,z)|^2$ sea grande para considerar que $\left| \frac{\partial^2 \xi(x,z)}{\partial z^2} \right| \ll \frac{2m\bar{U}_0}{\hbar^2} |\xi(x,z)|^2$ y aplicar esta aproximación.

Esquemáticamente nuestra región de interés es la región de color verde en la figura 4.5. Esta región es llamada “paraxial” porque es una región cónica alrededor del eje óptico.

En términos de la función de onda total, la condición en (4.16) se puede escribir como

$$\left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right|^2 \ll k_z^2 \text{Re} \left[\left(3k_z^2 \phi + 2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) \phi^* \right] + 4k_z \text{Im} \left[\left(k_z^2 \phi + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) \frac{\partial \phi^*}{\partial z} \right]. \quad (4.17)$$

Donde nuevamente se observa la necesidad de las condiciones enunciadas anteriormente para encontrar las soluciones analíticas en la región paraxial.

De acuerdo con las definiciones

$$\tau = \frac{m}{k_z \hbar} z, \quad E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \mu, \quad \xi(x, z) = e^{-\frac{iE\tau}{\hbar}} \chi(x, \tau), \quad (4.18)$$

obtenemos la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial \chi(x, \tau)}{\partial \tau} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 |\chi(x, \tau)|^2 \right] \chi(x, \tau). \quad (4.19)$$

Mientras que la solución que buscamos es de la forma

$$\phi(x, z, t) = e^{i \left[\frac{\mu}{\hbar} \left(\frac{mz}{\hbar k_z} - t \right) + \frac{1}{2} k_z z \right]} \chi(x, \tau). \quad (4.20)$$

La condición inicial para este problema la podemos considerar como

$$\chi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_x x} \left[1 - \Theta \left(-x - \frac{L}{2} \right) - \Theta \left(x - \frac{L}{2} \right) \right], \quad (4.21)$$

con k_x la componente del número de onda en la dirección x , asociado con una componente de la velocidad del centro de masa del condensado en la misma dirección.

De acuerdo a la expresión (2.167) podemos obtener en forma inmediata la solución para la ecuación (4.19) con la condición inicial (4.21). Además, considerando la magnitud del vector de onda plana y su ángulo de incidencia dados como $k = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$ y $\theta = \tan^{-1} \left[\frac{k_x}{k_z} \right]$, las expresiones que obtenemos son

$$\begin{aligned}
\phi(x, z, t) &= e^{i \left[\frac{\mu}{\hbar} \left(\frac{mz}{\hbar k_z} - t \right) + \frac{1}{2} k_z z + k_x \left(x - \frac{k_x}{2k_z} z \right) \right]} \left\{ 1 - \frac{2U_0 m}{3\sqrt{\pi} L^2 \hbar^2} \left(\frac{z}{k_z} \right)^{3/2} \right\} \\
&\cdot \left[\frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k_z}{2z}} \left(- \left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right) \right] + \frac{2iU_0 m z}{L k_z \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{k_z}{4z}} \left(- \left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right)^2 \right. \right. \\
&\cdot D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k_z}{z}} \left| - \left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(- \left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right) \left. \right\} \\
&+ \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k_z}{2z}} \left(\left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right) \right] + \frac{2iU_0 m z}{L k_z \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{k_z}{4z}} \left(\left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right)^2 \right. \\
&\cdot D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k_z}{z}} \left| \left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \operatorname{sgn} \left(\left(x - \frac{k_x}{k_z} z \right) - \frac{L}{2} \right) \left. \right\} \\
&= e^{i \left[\frac{\mu}{\hbar} \left(\frac{mz}{\hbar k \cos(\theta)} - t \right) + \frac{1}{2} k \cos(\theta) z + k \sin(\theta) \left(x - \frac{1}{2} \tan(\theta) z \right) \right]} \left\{ 1 - \frac{2U_0 m}{3\sqrt{\pi} L^2 \hbar^2} \left(\frac{z}{k \cos(\theta)} \right)^{3/2} \right\} \\
&\cdot \left[\frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k \cos(\theta)}{2z}} \left(- \left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \right. \\
&+ \frac{2iU_0 m z}{L k \cos(\theta) \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{k \cos(\theta)}{4z}} \left(- \left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right)^2 D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k \cos(\theta)}{z}} \left| - \left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \\
&\operatorname{sgn} \left(- \left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right) \left. \right\} + \frac{1}{2\sqrt{L}} \left\{ 1 - \operatorname{erfc} \left[-e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k \cos(\theta)}{2z}} \left(\left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right) \right] \right. \\
&+ \frac{2iU_0 m z}{L k \cos(\theta) \hbar^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\frac{k \cos(\theta)}{4z}} \left(\left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right)^2 D_{-3} \left[e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{k \cos(\theta)}{z}} \left| \left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right| \right] \\
&\operatorname{sgn} \left(\left(x - \tan(\theta) z \right) - \frac{L}{2} \right) \left. \right\}. \tag{4.22}
\end{aligned}$$

La posición del punto focal en función de la constante de acoplamiento, U_0 , es

$$\boxed{\vec{x}_f = \left(544.084 \times 10^{-4} - 3.442 \times 10^{-4} \frac{L U_0}{\hbar} \right) L^2 \{ k \sin \theta \hat{x} + k \cos \theta \hat{z} \},} \tag{4.23}$$

y en función del campo magnético B para la creación del condensado

$$\boxed{\vec{x}_f = \left(544.084 \times 10^{-4} - 43.2534 \times 10^{-4} \frac{L \hbar}{m} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right) \right) L^2 \{ k \sin \theta \hat{x} + k \cos \theta \hat{z} \}.} \tag{4.24}$$

Este punto focal es la posición de los átomos del condensado de Bose-Einstein que logran enfocarse después de que el haz incidente en dos dimensiones es difractado por la rendija. La densidad correspondiente a la función de onda se muestra en los gráficos de la figura 4.6.

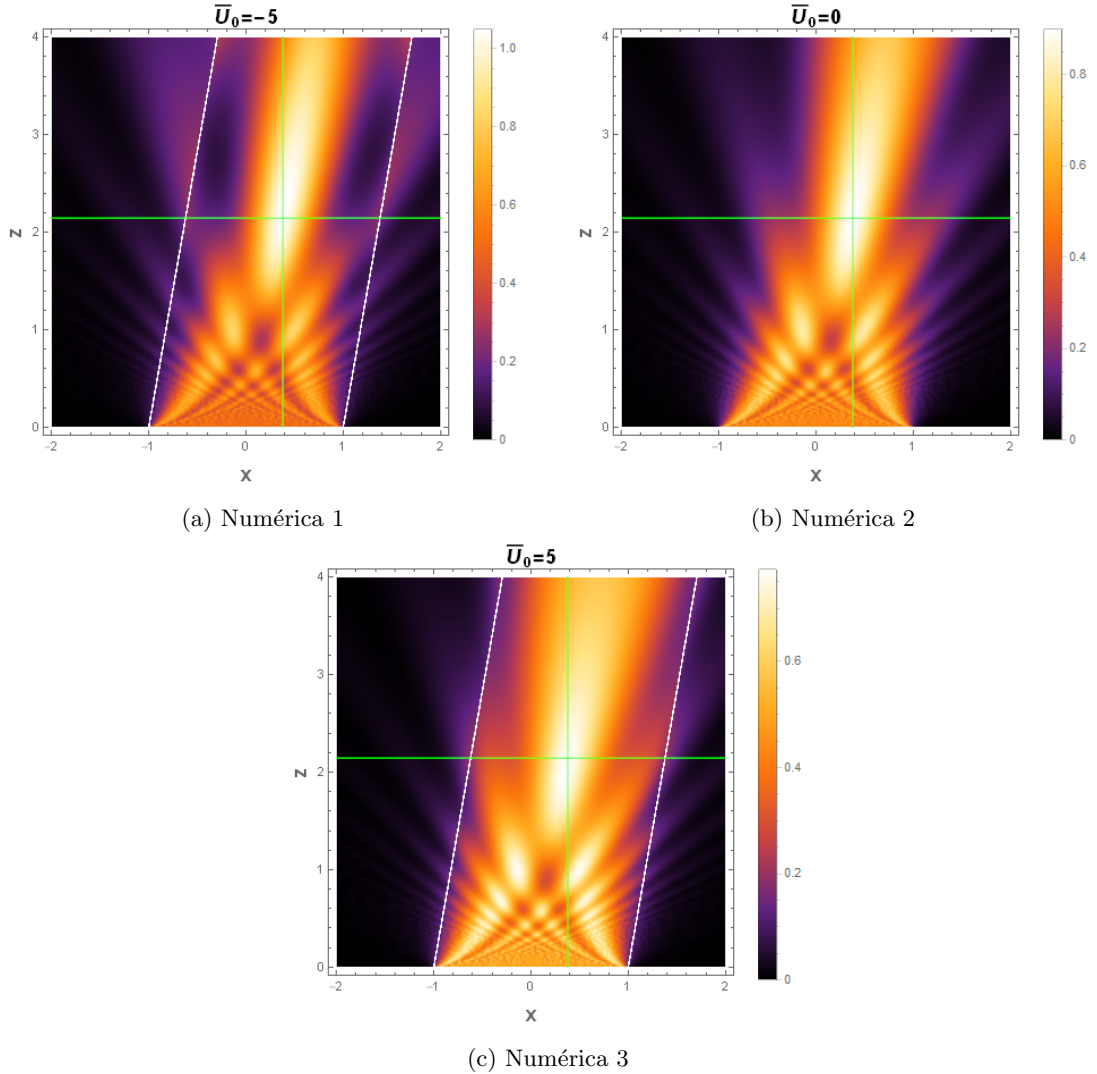


Figura 4.6: Difracción en 2D. Gráfica de densidad de la función $|\phi(x, z, t)|^2$, correspondiente a valores de la constante de acoplamiento (a) $\bar{U}_0 = -5$, (b) $\bar{U}_0 = 0$ y (c) $\bar{U}_0 = 5$. No hay dependencia temporal pero sí depende de la energía cinética del centro de masa asociado con \vec{k} . La intersección de las rectas color verde son el punto de enfocamiento para el caso $\bar{U}_0 = 0$. Para fines de visualización consideramos un ángulo $\theta = 10^\circ$.

De estos resultados obtenidos, es importante resaltar que la densidad de probabilidad, la cual nos permite observar el efecto difractivo, y la posición del punto de enfocamiento son independientes del tiempo pero dependientes de: a) la rapidez con la que incide el haz sobre la rendija, ya que de acuerdo a la longitud de onda de de Broglie y en el límite clásico, podemos considerar que $|\vec{v}| = (\hbar/m) |\vec{k}|$, es decir, nuestro análisis demanda una rapidez que permita satisfacer la condición en (4.16) o en (4.17); b) el tamaño de la rendija dado por L ; y c) la constante de acoplamiento U_0 en la descripción del condensado, o más específicamente del tipo de partícula y del campo magnético B sintonizado para dar origen al condensado mediante la resonancia de Feshbach. La última propiedad es la nueva alternativa propuesta en este trabajo para controlar el posicionamiento de materia aprovechando las propiedades estadísticas de un condensado de Bose-Einstein, es decir, proponemos usar condensados cuyo origen depende de la resonancia de Feshbach y permite establecer un nuevo parámetro de control en el fenómeno de la difracción de haces de materia.

Visualmente, este fenómeno se describe en los gráficos de la figura 4.6, donde hemos considerado variables naturales con $k = 10$ y $\theta = 10^\circ$. Evidentemente se puede apreciar que el punto de enfocamiento tiene la dirección del haz incidente sobre la rendija, y para $U_0 < 0$ pequeño, podemos observar un corto desplazamiento hacia arriba y a la derecha. Mientras que para $U_0 > 0$ pequeño, el desplazamiento es hacia abajo y a la izquierda, con respecto al punto focal en el cual $U_0 = 0$. Se puede probar con otros valores de los parámetros de control para obtener otras posiciones del punto de enfocamiento dentro de la región paraxial.

Capítulo 5

Conclusiones

En conclusión, hemos aprovechado los resultados obtenidos en la difracción en el tiempo, que resuelve el problema lineal, tanto para el obturador [18] como para la rendija [12, 13, 23] en una dimensión, y obtuvimos soluciones a problemas similares pero considerando una haz formado por condensados de Bose-Einstein. Observamos que las propiedades estadísticas mecánico-cuánticas del nuevo conjunto de átomos empleado nos llevó a un problema no lineal, cuya solución nos permitió encontrar un nuevo parámetro de control en el fenómeno de la difracción e interferencia producidos.

Para tiempos cortos y en el caso del obturador, la constante de interacción tiene un gran efecto en el desplazamiento de las cústicas hacia o desde la posición del borde del obturador. Mientras que para la rendija, esta constante es un nuevo parámetro que permite controlar el fenómeno difractivo y la posición del punto de enfocamiento. Estos resultados los comprobamos mediante soluciones numéricas implementadas a estos mismos problemas. Además, al igual que en el caso lineal, el tamaño de la rendija, el tipo de átomos usados y las propiedades dinámicas del haz incidente juegan un papel importante en esta descripción.

Para tiempos largos aprovechamos que la solución de cada problema lineal tiene un comportamiento de expansión espacial y decaimiento temporal, lo cual permitió encontrar la solución a cada problema no lineal correspondiente. Cada una de las nuevas soluciones construidas incorpora la solución para el caso lineal más otra corrección con comportamientos similares al primer caso e incluso con un orden mayor de decaimiento temporal y con una dependencia de la constante de acoplamiento que caracteriza el condensado.

Finalmente, culminamos este trabajo proponiendo una nueva alternativa en la litografía atómica para producir nano estructuras [15]. Estos efectos también pueden uti-

lizarse en experimentos de haces coherentes de materia en caída libre [8, 11], los cuales permiten determinar el efecto de la relatividad en física ondulatoria, especialmente la variación de fase y fenómenos cuánticos de interferometría. Con ello se pretende determinar con mayor precisión la constante de gravitación universal [9, 10]. Esta propuesta toma en cuenta el uso de condensados de Bose-Einstein para preparar ciertos haces cuya configuración corresponda a la llegada a una rendija en una dimensión, para que posteriormente se propague en un plano y origine el fenómeno de la difracción e interferencia independientes del tiempo y la energía térmica, pero dependientes de la energía de propagación del haz. En particular, resaltamos que el uso de condensados nos da un nuevo parámetro para sintonizar la posición de los átomos enfocados como función de la energía de campo medio a valores pequeños, que describe la energía de interacción del sistema, o el origen de éste mediante la resonancia de Feshbach. La propiedad cuántica del sistema juega un rol importante.

Bibliografía

- [1] C Townsend, W Ketterle y S Stringari. Bose-Einstein condensation. *Physics World*, 10:29-36, 1995.
- [2] R K Pathria and P D Beale. *Statistical Mechanics*. Elsevier Ltd, third edition, 2011.
- [3] S Balibar. Laszlo Tisza and the two-fluid model of superfluidity. *Comptes Rendus Physique*, 18(9-10):586-591, 2017.
- [4] D G Fried, T C Killian, L Willmann, D Landhuis, and et al. Bose-Einstein condensation in atomic hydrogen. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3811-3814, 1998.
- [5] F Dalfovo, S Giorgini, L P Pitaevskii and S Stringari. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, 71:463-512, 1999.
- [6] W D Phillips. *Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms*, 1998. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.721>.
- [7] E A Cornell y C E Wiemann. *Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas; the first 70 years and some recent experiments*, 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.74.875>.
- [8] S Abend, M Gersemann, C Schubert, and et al. Atom interferometry and its applications. *Foundations of quantum theory*, 197:345-392, 2019.
- [9] E R Elliott, M C Krutzik, J R Williams, R J Thompson, and et al. NASA's Cold Atom Lab (CAL): system development and ground test status. *NPJ Microgravity*, 4, 2018.
- [10] K Frye, S Abend, W Bartosch, A Bawamia, and et al. The Bose-Einstein Condensate and Cold Atom Laboratory. *EPJ Quantum Technol.*, 8(1):1-38, 2021.

-
- [11] H Müntinga, H Ahlers, M Krutzik, A Wenzlawski, and et al. Interferometry with Bose-Einstein Condensates in Microgravity. *Phys. Rev. Lett.*, 110:093602, 2013.
- [12] W B Case, E Sadurni y W P Schleich. A diffractive mechanism of focusing, *Opt. Express*, 20(25):27253-27262, 2012.
- [13] D Condado, J L Díaz Cruz, A Rosado y E Sadurní. Diffraction of particles in free fall. *Phys. Rev. A*, 98:043618, 2018.
- [14] R Colella, W A Overhauser, and S A Werner. Observation of gravitationally induced quantum interference. *Phys. Rev. Lett.*, 34:1472-1474, 1975.
- [15] M K Oberthaler and T Pfau. One-, two-and three-dimensional nanostructures with atom lithography. *J. Phys.: Condens. Matter*, 15:R233-R255, 2003.
- [16] H Goldstein and C P Poole. *Classical Mechanics*. Pearson, third edition, 2011.
- [17] L D Landau and E M Lifshitz. *The Classical Theory of Fields*. Pergamon Press, third edition, 1971.
- [18] M Moshinsky, Diffraction in Time, *Phys. Rev.*, 88:625-631, 1952.
- [19] G B Arfken and H J Weber. *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier Academic Press, sixth edition, 2005.
- [20] M Moshinsky, E Sadurní and A del Campo. Alternative method for determining the Feynman Propagator of a non-relativistic quantum mechanical problem. *Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*, 3:110-121, 2007.
- [21] I S Gradshteyn and I M Ryzhik. *Table of integrals, series and products*. Elsevier Academic Press, 2007.
- [22] N P Proukakis and B Jackson. Finite Temperature Models of Bose-Einstein Condensation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 41(20):203002, 2002.
- [23] E Sadurní. Phase Space Evolution and Discontinuous Schrödinger Waves. In *Journal of Physics Conference Series*, volume 343 of *Journal of Physics Conference Series*, page 012106, 2012.

-
- [24] J Durnin, J J Miceli, and J H Eberly. Diffraction-free beams. *Phys. Rev. Lett.*, 58:1499-1501, 1987.
- [25] V Bagini, F Frezza, M Santarsiero, G Schettini, and G Spagnolo. Generalized Bessel-Gauss beams. *Journal of Modern Optics*, 43:1155-1166, 1996.
- [26] J Durnin. Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory. *J. Opt. Soc. Am. A*, 4(4):651-654, 1987.
- [27] C Chin, R Grimm, P Julienne, and E Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 82:1225-1286, 2010.
- [28] T Kraemer, Jens Herbig, M Mark, T Weber, C Chin, H-C Nägerl, and R Grimm. Optimized production of a cesium Bose-Einstein condensate. *Applied Physics B*, 79:1013-1019, 2004.
- [29] A J Moerdijk, B J Verhaar, and A Axelsson. Resonances in ultracold collisions of ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, and ${}^{23}\text{Na}$. *Phys. Rev. A*, 51:4852-4861, 1995.
- [30] C C Bradley, C A Sackett, and R G Hulet. Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number. *Phys. Rev. Lett.*, 78:985-989, 1997.
- [31] J L Roberts, N R Claussen, S L Cornish, and C E Wieman. Magnetic Field Dependence of Ultracold Inelastic Collisions near a Feshbach Resonance. *Phys. Rev. Lett.*, 85:728-731, 2000.
- [32] A Jaouadi, N Gaaloul, B Viaris de Lesegno, M Telmini, L Pruvost, and E Charron. Bose-Einstein condensation in dark power-law laser traps. *Phys. Rev. A*, 82:023613, 2010.
- [33] J D Miller, R A Cline, and D J Heinzen. Far-off resonance optical trapping of atoms. *Phys. Rev. A*, 47:R4567-R4570, 1993.
- [34] C Raman, M Köhl, R Onofrio, and et al. Evidence for a Critical Velocity in a Bose-Einstein Condensed Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 83(13):2502-2505, 1999.
- [35] P Muruganandam and S K Adhikari. Bose-Einstein condensation dynamics in three dimensions by the pseudospectral and finite-difference methods. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 36(12):2501-2514, 2003.

- [36] P Boegel, M Meister, J-N Siemβ, and et al. Diffractive focusing of a uniform Bose-Einstein condensate. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 54(18):5301-5315, 2021.