



Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas
“Mat. Luis Manuel Rivera Gutiérrez”

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE FORMACIÓN DEL CONDENSADO DE BOSE DEL RUBIDIO 87

Tesis
que para obtener el grado de
Licenciada en Ciencias Físico-Matemáticas

presenta

Itzayana del Carmen Izquierdo Guzmán

Morelia, Mich. Agosto de 2017

Director de tesis:
Dr. Francisco S. Guzmán Murillo
Instituto de Física y Matemáticas,
UMSNH.

*A mis padres, mis hermanas, mis abuelitos, mis tios, mis primos.
A Sofía, la luz de mis ojos.*

Resumen

Esta tesis se enfoca en la implementación de un programa cuyo fin es simular la formación de un condensado de Bose-Einstein a partir de un gas atómico. Para ello se supone que el gas atómico se puede modelar con la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP), que es una representación macroscópica de campo medio de un condensado a muy bajas temperaturas. La ecuación de GP es matemáticamente la ecuación de Schrödinger, con una interpretación macroscópica. Es decir, es una ecuación diferencial parcial dependiente del espacio y del tiempo, con un potencial externo al gas y otro de autointeracción entre los átomos. Para resolverla se plantea como un problema de valores iniciales que evolucionan en el tiempo.

El programa resuelve numéricamente dicha ecuación en tres dimensiones espaciales. El método numérico utilizado para ello es el método de líneas implementado sobre un dominio cúbico discreto, con una malla cúbica que usa refinamientos de mayor resolución en las regiones del dominio donde se requiera mayor precisión. Usando dicho dominio discreto se aproxima la ecuación usando diferencias finitas. Se aplican varias pruebas al programa, que consisten en reproducir soluciones exactas conocidas y se verifica que las soluciones numéricas son consistentes con las exactas.

Una vez probado el programa se resuelve la ecuación de GP con los parámetros de masa del Rb-87 y las características de la trampa con láseres y magnetos que se utilizaron en los experimentos de construcción del primer condensado de Bose. En la ecuación de GP, las trampas se modelan con un potencial armónico. La autointeracción entre átomos es un término potencial no-lineal, cuyos parámetros dependen del número de átomos del gas. Practicamos distintos experimentos numéricos y estudiamos las condiciones bajo las cuales nuestras soluciones numéricas indican la formación de un condensado de Bose-Einstein.

Palabras clave: condensado, Bose-Einstein, Diferencias Finitas, Método de Líneas, simulación, Schrödinger.

Abstract

This thesis focuses on the implementation of a code whose aim is to simulate the formation of a Bose-Einstein condensate out of an atomic gas. For that we assume the atomic gas to be modeled by the Gross-Pitaevskii equation (GP), which is a macroscopic representation in the mean field of a condensate at ultralow temperatures. The GP equation is mathematically the Schrödinger equation, with a macroscopic interpretation. We solve it as an initial value problem for initial data evolving in time.

The code numerically solves such equation in three spatial dimensions. The numerical method used for that is the method of lines implemented on a discrete cubic domain, with a cubic mesh that uses mesh refinement in the regions where more precision is required. Using such discrete domain the equation is discretized using finite differences. The code is tested with the reproduction of known exact solutions and the consistency of the numerical solutions is verified.

After the tests we solve the GP equation with the mass parameters of Rb-87 and the characteristics of the laser and magnet traps used in the experiment of the first Bose condensate. In the GP equation, the traps are modeled with a harmonic potential. The self-interaction among atoms is a non-linear potential term, whose parameters depend on the number of atoms in the gas. We practiced a number of numerical experiments and studied the conditions under which the numerical solutions indicate the formation of a Bose-Einstein condensate.

Índice general

1. Introducción	11
2. Descripción del experimento del condensado de Bose-Einstein de Rb-87 y el modelo numérico	13
2.1. Obtención experimental del BEC	13
2.2. Modelo numérico	19
3. El programa para simular el proceso	21
3.1. Métodos numéricos	21
3.2. Método de líneas	26
3.3. Implementación y pruebas con soluciones exactas	31
3.4. Partícula en una caja	31
3.4.1. Solución exacta	31
3.4.2. Solución numérica	33
3.4.3. Prueba	34
3.5. Partícula en un potencial de oscilador armónico isotrópico	35
3.6. Partícula en un potencial de oscilador armónico anisotrópico	42
3.6.1. Solución exacta	42
3.6.2. Pruebas	44
4. Simulación del condensado de Rb-87	49
4.1. Experimento numérico	53
4.1.1. Caso 1: Condensado con un potencial armónico isotrópico	54
4.1.2. Caso 2: Condensado con un potencial anisotrópico	66
5. Conclusiones	83
Bibliografía	85

Capítulo 1

Introducción

En el año de 1924, Einstein predijo un nuevo estado de la materia conocido como Condensado de Bose-Einstein (por sus siglas en inglés *BEC*), esta predicción se basó en las ideas que Bose tenía sobre los fotones, “*En un sistema de partículas que obedecen la estadística de Bose y el número total de éstas se conserva. Éstas pueden estar bajo cierta temperatura de tal manera que una fracción finita de todas estas partículas se condensa sobre el mismo estado*” [1]. Einstein demostró que un gas de bosones sin interacciones a una temperatura inferior a una temperatura crítica, un gran número de estos bosones pasan al estado de la partícula que posea la mínima energía. Años después en 1938, London realizó un trabajo en el que logró hacer una conexión entre los BECs y la superfluidez del Helio 4, con este descubrimiento se pudieron sentar las bases de los conceptos físicos que describen este fenómeno. Sin embargo, al formar el BEC con átomos de Helio 4. La fracción condensada se reducía considerablemente incluso a muy bajas temperaturas. Debido a esto se comenzó a investigar otros gases que tuvieran las propiedades requeridas pero que no presentaran el efecto del He-4; uno de ellos fue un sistema atómico diluido formado por átomos de hidrógeno [3].

Esta búsqueda llevó a los científicos a trabajar con gases de Bose diluidos [2]. Estos gases formaban BECs, cuyos átomos interactúan débilmente, pero no fue hasta el año de 1995 que Anderson, Wieman, Cornell y otros científicos observaron en el laboratorio la formación de un BEC de Rb-87 [3]. En la actualidad se han logrado BECs de Sodio (Na), Litio (Li) y Rubidio (Rb) y se han mejorado las técnicas mediante las cuales se obtienen condensados formados por una cantidad grande de átomos y que se preservan por más tiempo.

En este trabajo se simula numéricamente la formación del condensado con los parámetros del experimento de Anderson [3] como se hizo en [4], pero en esta ocasión usando un programa independiente y en 3D. Para ello es necesario usar un modelo de BEC. El más elemental es el que usa la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP)

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \tilde{\Psi} + V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) \tilde{\Psi} + NU_0 |\tilde{\Psi}|^2 \tilde{\Psi}, \quad (1.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck h dividida por 2π , m es la masa de los átomos, N representa el número de átomos, U_0 está dado por $\frac{4\pi\hbar^2\tilde{a}}{m}$ (donde \tilde{a} es la distancia a la cual los átomos comienzan a sentir la presencia de otros átomos) y el potencial $V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ representa el potencial de las trampas experimentales a que se somete el gas. La ecuación (1.1) modela la evolución de la función de onda, además los valores de los parámetros de la ecuación (1.1) fueron tomados de los datos usados en el experimento realizado por Anderson [3]. A pesar de que aparece \hbar , ésta es una ecuación macroscópica, dado que $\tilde{\Psi}$ representa una función de onda colectiva para todo el gas y $\rho = |\tilde{\Psi}|^2$ es la distribución espacial de los átomos. La ecuación (1.1) es parcial dependiente del tiempo y en tres direcciones espaciales. Para resolverla se construyó un programa que usa métodos numéricos basados en Diferencias Finitas y el Método de Líneas, que permiten conocer a $\tilde{\Psi}$ como función del tiempo y la posición, y con ello conocer las propiedades del gas.

Uno de los objetivos es identificar y relacionar cada paso del procedimiento experimental con la solución numérica. De la solución numérica se monitorean tres cosas: la densidad, la función de onda y la energía cinética proyectadas en los distintos planos del dominio numérico, ya que nos darán información importante sobre la formación del BEC.

El objetivo de este trabajo es por una parte, saber si el modelo de GP es capaz de modelar el proceso de formación del BEC con parámetros experimentales. Por otra parte es programar un código que permite hacer experimentos numéricos mediante la solución de EDP asociadas a Problemas de Valores Iniciales (PVI). Un PVI es aquel que consta de una EDP en el tiempo, datos iniciales y condiciones de frontera.

El trabajo se ha dividido en cuatro capítulos. En el capítulo 2, se describe el experimento de Anderson, se plantea el modelo numérico y se relaciona el experimento con el modelo numérico. En el capítulo 3, se describen los métodos numéricos utilizados, el método de Diferencias Finitas y el Método de Líneas, y se hacen pruebas del código con ecuaciones que tienen soluciones exactas. En el capítulo 4, se hace la simulación del condensado de Bose-Einstein para el Rb-87. Finalmente en el capítulo 5 se da una conclusión sobre los resultados obtenidos de las simulaciones.

Capítulo 2

Descripción del experimento del condensado de Bose-Einstein de Rb-87 y el modelo numérico

2.1. Obtención experimental del BEC

Cuando los átomos son sometidos a bajas temperaturas, la longitud de onda de De Broglie se va haciendo más grande. Esto se debe a que la longitud de onda de De Broglie (λ_{db}) es inversamente proporcional a la temperatura como lo muestra la siguiente ecuación [3]:

$$\lambda_{db} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}, \quad (2.1)$$

donde h es la constante de Planck, m es la masa del átomo, k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura. En este punto las partículas ya no se comportan como partículas individuales sino como un colectivo de partículas que se comportan como una sola, descrito por una onda. Por esta razón se busca observar como se comporta la densidad del espacio fase, la cual es determinada por la ecuación:

$$\rho_{ps} = n(\lambda_{db})^3, \quad (2.2)$$

donde n es la densidad del espacio fase [3].

Existe un umbral a partir del cual la interacción entre los átomos comienza a ser importante como se muestra en la Figura 2.1; es decir, λ_{db} se hace lo suficientemente grande para que los átomos comiencen a interactuar. Este umbral es determinado por la función zeta de Riemann $\zeta(3/2)$ cuyo valor es 2.612, por esta razón $\rho_{ps} > 2.612$ [6].

Obtener un BEC no fue tarea fácil ya que se tuvieron que tomar en cuenta distintos factores, uno de ellos fue que los BECs no se encuentran en la naturaleza, por lo que no

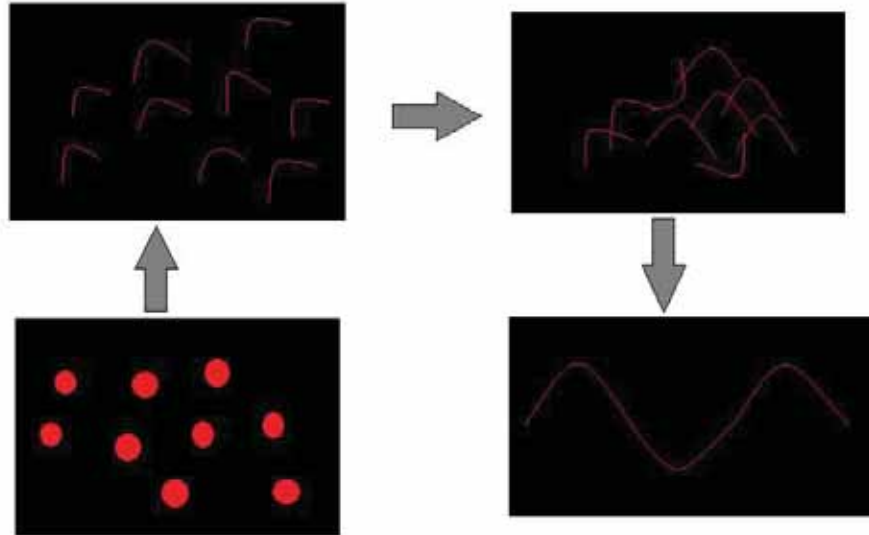


Figura 2.1: En este esquema se muestra la dualidad onda-partícula, las partículas se comportan como ondas individuales, después de ser sometidas a distintos procesos, las cuales se explican enseguida, comienzan a intersectarse debido a que λ_{ps} se hace más grande, por lo que al final del proceso se ve una sola onda.

se contaba con ningún punto de partida y por tanto llegar a determinar cual era la serie de procesos y las condiciones requeridas no fue una tarea sencilla. Así que el primer reto es encontrar la forma de aumentar la densidad del espacio fase, para lograrlo se hace una aproximación que consiste en: primero poner una muestra que contiene ciertos átomos bajo los efectos de un láser, esto produce que los átomos permanezcan en un lugar fijo en el espacio, segundo ser confinados por una trampa magnética y tercero evaporar los átomos más calientes. El siguiente reto fue determinar cuales átomos eran ideales para tal tarea; después de muchos intentos fallidos utilizando distintos sistemas se llegó a determinar que un sistema diluido formado por un gas atómico que interactúa débilmente funcionaría. Las interacciones entre átomos son débiles y bien entendidas, lo que nos acerca más al concepto original de Einstein y Bose. Tales sistemas son formados por átomos alcalinos pesados, estos son adecuados porque son fácilmente congelados y atrapados por luz láser y la sección eficaz que poseen es mayor, lo que facilita la evaporación de los átomos.

Existen tres hechos importantes que se deben mencionar acerca de los átomos alcalinos que forman un BEC en un experimento [3]:

- Para medir la densidad y la energía de una nube formada por dichos átomos se puede usar la dispersión de la luz.
- Las interacciones átomo-átomo son débiles y bien entendidas.

- Las interacciones de los átomos pueden ser variadas de una forma controlada mediante la elección del spin de los átomos, la densidad del gas y la aplicación de campos externos.

En 1995 Anderson y otros científicos lograron crear el primer BEC formado por átomos de Rb-87 [3]. Un esquema del aparato que se utilizó en la creación del BEC se muestra en la Figura 2.2.

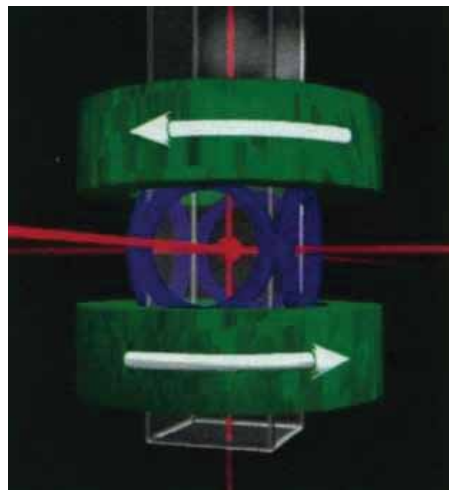


Figura 2.2: Se muestra el montaje construido para la realización del experimento tomada de [3]. Se pueden apreciar seis rayos láser que se encuentran incidiendo sobre la caja de vidrio en alto vacío donde se encuentra el vapor de átomos de Rb-87 y sobre la caja dos imanes circulares que se encuentran rotando en direcciones opuestas uno respecto del otro, lo que forma una trampa cuadrupolar.

El primer paso a realizarse fue hacer que los átomos del gas se situaran en un lugar específico dentro de la caja, esto implicó un gran reto ya que los átomos contenidos en un gas tienen altas velocidades, lo que dificulta tomar mediciones y estudiar las interacciones débiles entre los átomos, es por ello que resulta necesario disminuir la velocidad a la que se mueven [5], lo cual se logró usando la transferencia de momento, para lograrlo se emplea una trampa magneto-óptica (*MOT* por sus siglas en inglés). Dicha trampa consiste en colocar rayos láser ubicados uno frente al otro en las direcciones x , y y z . Un esquema unidimensional es mostrado en la Figura 2.3. Si el átomo se mueve hacia la izquierda el rayo láser que se encuentra ubicado en el lado opuesto hará que la velocidad del átomo disminuya, lo mismo ocurre para un átomo que se mueve hacia la derecha. Lo anterior se hace para las otras dos direcciones espaciales, lo que provoca que los átomos se mantengan fijos en un lugar específico dentro de la caja.

Una vez que se tienen los átomos en el centro de la caja, el siguiente paso es introducir una trampa magnética que consiste de un cuadrupolo esférico ubicado fuera de la caja como se ve en la Figura 2.2. Un esquema del campo magnético generado por el cuadrupolo se muestra en la Figura 2.4. La razón para introducir este campo magnético es que

si se considera un átomo con momento magnético y si se aumenta la intensidad del campo magnético, este átomo tendrá estados cuya energía aumentará y estados cuya energía disminuirá dependiendo de la orientación del momento magnético con respecto al campo, de esta manera los átomos pueden ser atrapados dentro del campo magnético. Finalmente para tener una trampa estable la orientación del momento magnético con respecto al campo no debe cambiar, esto pasa cuando la energía cinética es suficientemente baja para que el momento magnético se mueva adiabáticamente en el campo [5].

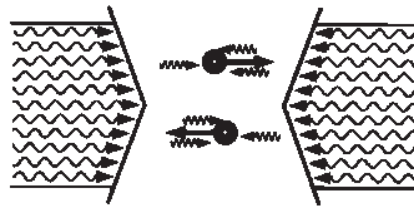


Figura 2.3: Este esquema fue tomado de [5] y en él se aprecia cómo los átomos que se encuentran entre dos láseres, después de cierto tiempo se detendrán.

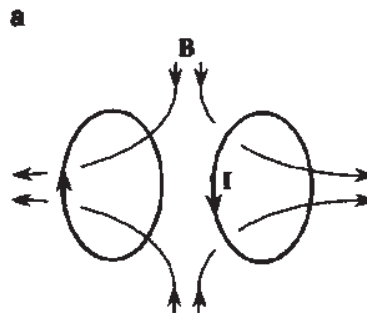


Figura 2.4: Esta representación del cuadrupolo esférico fue tomada de [5].

Este arreglo formado por los láseres y el cuadrupolo esférico, da como resultado un potencial armónico tridimensional elongado en la dirección z , el cual tiene simetría axial y una frecuencia de oscilador armónico, propiedades que se explotan para modelar el proceso.

Otra etapa en el proceso es la evaporación de los átomos más calientes, este proceso puede llevarse a cabo sólo si la densidad es suficientemente alta para que los átomos sufran muchas colisiones elásticas durante el tiempo que se encuentren en la trampa. Para lograr que sólo los átomos con la energía más baja permanezcan dentro de la trampa se emplea un método que consiste en atrapar y almacenar a los átomos en la intersección de los láseres, aquí los átomos están inmóviles debido a los láseres, después de un período corto los láseres son apagados y los átomos comienzan a dispersarse saliendo de la región donde originalmente estaban confinados para finalmente encender de nuevo los láseres, atrapando

sólo a los átomos que permanecieron en la región de intersección. Una representación de este método se puede ver en la Figura 2.5. Después de realizar varias veces el procedimiento anterior se puede determinar la distribución de velocidad y por lo tanto la temperatura de los átomos [5]. En la práctica este proceso se lleva a cabo fijando un campo magnético con una radio frecuencia (rf) y se comienza a disminuir lentamente, lo que produce un incremento de la densidad central y el índice de colisiones, mientras que por otro lado hay una disminución de la temperatura. Es por estas razones que la temperatura y la densidad del espacio fase de la muestra dependen del valor final de la radio frecuencia rf (ν_{evap}).

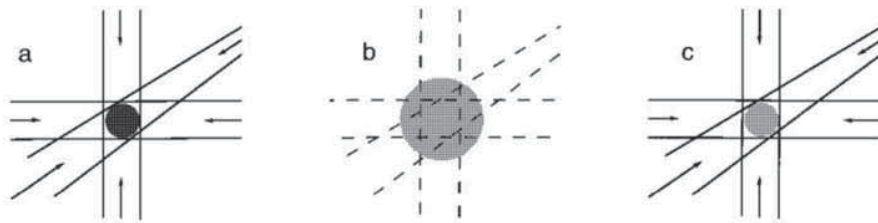


Figura 2.5: El esquema fue tomado de [5]. En la imagen *a* se muestran los átomos atrapados entre las intersecciones de los láseres. En la imagen *b*, los láseres han sido apagados y los átomos se han comenzado a expandir para finalmente como lo muestra la imagen *c* los láseres son encendidos nuevamente quedando sólo los átomos que permanecieron en el área de intersección de los láseres.

El proceso mediante el cual los átomos son llevados a temperaturas del orden de 10^{-9} K y evaporados es el siguiente [3]:

1. Durante 300 s la trampa MOT recolecta átomos contenidos en el vapor de Rb-87 que se encuentran a temperatura ambiente.
2. La nube de átomos es comprimida rápidamente y ópticamente congelada a $\sim 20 \mu K$. Esto se logra al ajustar el gradiente del campo y la frecuencia del láser.
3. Se aplica una pequeña inclinación al campo magnético y un pequeño pulso proveniente de una luz láser que está circularmente polarizada, lo que provoca que los momentos magnéticos de los átomos se pongan en la misma dirección que el campo magnético.
4. Se apaga la luz láser y el cuadrupolo es encendido durante un 1 ms, manteniendo de esta manera los átomos atrapados.
5. La componente del campo del cuadrupolo de la trampa TOP se aumenta adiabáticamente hasta alcanzar su valor máximo, de este modo las colisiones elásticas aumentan. En este punto se tienen 4×10^6 átomos con una temperatura de alrededor de $90 \mu K$ en la trampa. La trampa tiene una frecuencia de oscilación axial de 120 Hz y una

frecuencia radial cilíndricamente simétrica más pequeña por un factor de aproximadamente $\sqrt{8}$.

6. La muestra es evaporada para conservar sólo los átomos con la energía más baja durante 70 s.
7. Cuando la evaporación ha finalizado, se deja expandir la nube con el fin de medir la distribución de velocidad.
8. Después de 60 *ms* de expansión los átomos alcanzan la temperatura crítica T_c , que permite que los átomos se acumulen rápidamente en el estado de mínima energía.

Una vez hecho el procedimiento anterior, la sombra de la nube de átomos se analiza con un conjunto de dispositivos ópticos y digitales para su análisis. La imagen obtenida representa la distribución de velocidad proyectada sobre el plano de la imagen. Por lo que de la imagen se obtuvieron la velocidad y la distribución de la coordenada espacial de la densidad.

Bajo esta transición lo que se espera ver es una nube de dos componentes, la cual tiene una parte condensada densa en el centro rodeada por una fracción no condensada. En la Figura 2.6 se muestran imágenes del condensado formado en el laboratorio por primera vez [3].

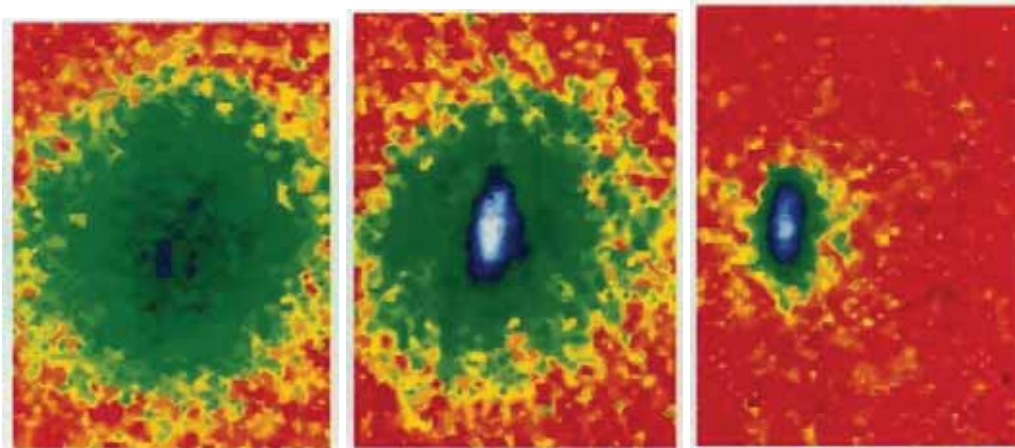


Figura 2.6: Representan la velocidad de distribución de la nube. La primera representa la nube en el momento antes de que aparezca el condensado; mientras que la segunda contiene el condensado formado después de que la muestra ha sido evaporada por un largo período y la tercera es después de unos segundos y se ve que la densidad del espacio fase esta más concentrada. Las imagenes fueron tomadas de [3].

En el equilibrio térmico, las distribuciones de velocidad de un gas son isotrópicas independientemente de la forma del potencial que los mantiene confinados. Una vez que se

logra que la temperatura sea del orden de $10^{-9}K$, los átomos condensados son descritos por la misma función de onda según la aproximación de campo medio consistente con la ecuación de GP, la cual tendrá un potencial consistente con el potencial de confinamiento.

2.2. Modelo numérico

Cuando los átomos alcanzan la temperatura crítica, T_c , pasan a ocupar los niveles más bajos de energía, lo que ocasiona que dichos átomos adquieran la misma frecuencia de oscilación dando lugar a la formación del BEC. Para modelar el comportamiento de los átomos que forman el condensado se emplea la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP); ésta es una aproximación de campo medio. La ecuación de GP es la ecuación de Schrödinger no lineal para átomos neutros condensados en una trampa armónica, la cual tiene una interpretación macroscópica. La ecuación de GP proporciona la evolución de la función de onda que describe a los átomos que forman el BEC y tiene la forma:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) + NU_0 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.3)$$

donde $\vec{r} = (x, y, z)$ es la posición espacial de un elemento de volumen de gas, m es la masa de un átomo de Rb-87. El potencial $V(\vec{r})$ dado por la siguiente ecuación:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \omega_{trampa}^2 (x^2 + y^2 + \epsilon z^2). \quad (2.4)$$

El potencial dado por la ecuación 2.4 es el potencial de confinamiento, que en el caso del condensado de Rb-87 corresponde a un potencial armónico anisotrópico con dos constantes de resorte iguales en el plano horizontal xy y la tercera constante de resorte es ϵ veces más grande en la dirección de z . Este potencial simula el generado por los láseres y los campos magnéticos, los cuales son usados en el experimento para confinar los átomos de Rb-87 en el centro de la caja. La constante de resorte en la dirección de z es un efecto de la trampa armónica. Debido a la auto-interacción intrínseca producida por las colisiones de los átomos que se encuentran en el estado base, se genera un segundo potencial que está representado en la ecuación (2.3) por el término no lineal de la ecuación:

$$NU_0 |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.5)$$

donde N es el número total de átomos en el condensado y U_0 es el término que representa la interacción átomo-átomo y está dado como:

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (2.6)$$

El parámetro a es la longitud de dispersión del estado base, es decir a partir de esta distancia los átomos comienzan a sentir la presencia de los otros átomos.

Para iniciar con la simulación se considera que el término de auto-interacción se encuentra apagado; por lo que la trampa armónica es encendida hasta su máximo valor. Después el término de auto-interacción es encendido lentamente, simulando la parte donde se están agregando los átomos al sistema, esto se hace agregando una función creciente en el tiempo t , $G(t)$, frente al término no lineal de la ecuación de GP y tiene la forma:

$$G(t) = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\frac{\pi t}{t_r}\right) \right], \quad (2.7)$$

donde t_r es el tiempo en que $G(t)$ alcanza su máximo valor $G(t) = N$. A partir de $t > t_r$, $G(t)$ se mantiene constante, con el fin de simular que el sistema ahora tiene N átomos. Una vez que los átomos han sido confinados dentro del potencial armónico se inicia el proceso de evaporación. Esto se modela como una reducción de la frecuencia ω_{trampa} en la ecuación (2.4) hasta alcanzar un valor de $\frac{\omega_{trampa}^2}{2}$. Cuando el proceso de evaporación se termina y sólo permanecen los átomos que se encuentran en el nivel más bajo de energía, la muestra se deja expandir por un lapso de 60 *xms*; esto es, la frecuencia $\frac{\omega_{trampa}^2}{2}$ permanece constante. Finalmente se toma la imagen de la nube en el plano xz que representa la que se obtuvo durante el experimento y se espera a ver si la densidad aumenta en el centro de la trampa, a la vez que la energía cinética disminuye.

Los pasos realizados en el experimento se modelan numéricamente de la siguiente forma:

- Los átomos son agregados mediante el factor dependiente del tiempo que es agregado al término no lineal de la ecuación (2.3). Esto corresponde a la primera parte del procedimiento experimental.
- El potencial armónico generado por los láseres y por el cuadrupolo es descrito por el potencial de la ecuación (2.4) correspondiente a los puntos 2 y 3 del proceso.
- Una vez que los átomos han sido incorporados y atrapados, el término del potencial es reducido por un factor de $\frac{1}{8}$, esto corresponde a los pasos 4, 5 y 6.
- Una vez hechos los pasos anteriores, la muestra se deja expandir por 60 ms.
- Por último se analiza la evolución de $\tilde{\Psi}$, $\rho = |\tilde{\Psi}|^2$ y $K = \frac{1}{2}\tilde{\Psi}^* \nabla^2 \tilde{\Psi}$ que es el integrando de la energía cinética, y cuyo valor indica la distribución espacial de la energía cinética. Se busca que ocurra lo que en el experimento, o sea, una zona de alta densidad y baja energía cinética. Esto corresponde a la última parte del experimento.

Capítulo 3

El programa para simular el proceso

El universo de ecuaciones diferenciales que poseen una solución exacta es demasiado reducido y modelan fenómenos naturales. Sin embargo, la mayoría de las ecuaciones que modelan fenómenos observados en la naturaleza son ecuaciones que no poseen soluciones exactas o son difíciles de deducir, pero que requieren de una solución para poder observar dichos fenómenos. Es por esta razón que los métodos numéricos juegan un papel muy importante en la solución de modelos matemáticos, debido a que proporcionan una gran cantidad de herramientas para resolver con mayor facilidad las EDs. Actualmente existen muchos métodos numéricos que resuelven EDs de manera eficiente, dentro de los cuales están el Método de Diferencias Finitas y el Método de Líneas construidos para resolver EDPs. En este trabajo se describen ambos métodos.

3.1. Métodos numéricos

Uno de los métodos más usados para resolver Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) es el Método de Diferencias Finitas. Este método consiste en definir las funciones y las variables que involucra la EDP en un dominio discretizado donde se busca una solución de la ecuación, después se aproximan las derivadas parciales individuales mediante aproximaciones de diferencias finitas. Una vez hecho esto, las aproximaciones se sustituyen en la EDP para obtener una versión discreta de la EDP que finalmente se resuelve.

La ecuación en diferencias finitas contiene funciones y variables que dependen de la posición \vec{x} y del tiempo t , las cuales requieren estar definidas en un conjunto de puntos que pertenecen a un dominio espacial y temporal que se definen de modo abstracto como $[x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}] \times [t_0, t_f]$. Dicho dominio espacio-temporal se discretiza como $x_i = x_{min} + i\Delta x$, $y_j = y_{min} + j\Delta y$, $z_k = z_{min} + k\Delta z$ y $t^n = n\Delta t$ respectivamente, donde $i = 0, 1, \dots, N_x$, $j = 0, 1, \dots, N_y$, $k = 0, 1, \dots, N_z$ y $n = 0, 1, \dots, N_t$ son enteros que etiquetan los puntos donde estará definida la ED en el dominio discreto. De esta manera, una función $f(x, y, z)$ queda definida sólo en los puntos (t^n, x_i, y_j, z_k) y se denota aquí como f_{ijk}^n . Los

valores extremos del dominio espacio-temporal se toman como la frontera que delimita el dominio del problema en cuestión, por lo que se requiere imponer condiciones de frontera en estos puntos [9].

Al definir de esta manera el dominio, se crea una malla uniformemente espaciada. De acuerdo con la definición de la malla se tienen las resoluciones espaciales $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, $\Delta y = y_{j+1} - y_j$, $\Delta z = z_{k+1} - z_k$ y la temporal $\Delta t = t^{n+1} - t^n$.

Una vez que el dominio ha sido discretizado, se hacen las aproximaciones de los términos en la EDP incluyendo operadores diferenciales a diferentes órdenes, partiendo de la suposición de que las funciones involucradas tienen una expansión en serie de Taylor.

Derivada de primer orden

Para ilustrar estas aproximaciones se considera el caso de un dominio en una dimensión [8]. Partiendo de las expansiones en serie de Taylor de una función f_i^n definida en un dominio con una dimensión espacial, cuya malla usa etiqueta i , es posible calcular valores aproximados de las derivadas de dicha función f_i^m , usando valores de f en puntos vecinos. Dependiendo del grado de precisión con el cual queremos calcular la aproximación se usan valores de f con mayor o menor número de puntos vecinos.

Para construir aproximaciones de las derivadas de f conviene hacer expansiones en serie de Taylor, haciendo uso de que se conocen los valores de f en los puntos vecinos x_{i+1} , x_{i-1} . Se consideran las siguientes tres expansiones:

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3),$$

$$f(x_i) = f(x_i),$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3).$$

De una combinación lineal de las expresiones anteriores se obtiene la expresión para la primera derivada en el punto x_i con un error de segundo orden:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2\Delta x} + O(\Delta x^2).$$

Esta aproximación se conoce como 'centrada' debido a que la derivada de f en x_i se calcula usando los valores de la función en un punto a la izquierda f_{i-1}^n y un punto a la derecha f_{i+1}^n .

Otra aproximación útil es la 'no centrada', con una expansión de dos puntos a la derecha de x_i y se calcula de la siguiente manera [8]

$$f(x_i) = f(x_i),$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3),$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2\Delta x f'(x_i) + \frac{4\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3),$$

usando la combinación $f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 3f(x_i)$ se obtiene otra expresión para la derivada en x_i :

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2),$$

y de forma análoga es la aproximación de la derivada usando dos puntos hacia la izquierda:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2). \quad (3.1)$$

En este trabajo se utiliza la aproximación 'centrada'.

Derivada de segundo orden

Para calcular la aproximación de la derivada de segundo orden es necesario hacer expansiones en serie de Taylor y construir combinaciones tales que los coeficientes de las derivadas de orden cero, primero, tercero y superiores sean cero [8]. Así, la derivada de segundo orden con un error de cuarto orden se estima a partir de las series de Taylor desarrolladas hasta orden $O(\Delta x^4)$:

$$f(x_{i-2}) = f(x_i) - 2\Delta x f'(x_i) + \frac{4\Delta x^2}{2} f''(x_i) - \frac{8\Delta x^3}{6} f'''(x_i) + O(\Delta x^4),$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) - \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_i) + O(\Delta x^4),$$

$$f(x_i) = f(x_i),$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + \frac{\Delta x^3}{6} f'''(x_i) + O(\Delta x^4),$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2\Delta x f'(x_i) + \frac{4\Delta x^2}{2} f''(x_i) + \frac{8\Delta x^3}{6} f'''(x_i) + O(\Delta x^4).$$

La combinación lineal de las expresiones anteriores que satisface los requisitos mencionados, en el caso centrado es $-f(x_{i-2}) + 16f(x_{i-1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})$ y la expresión aproximada para la derivada de segundo orden es la siguiente:

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 16f(x_{i-1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4).$$

Para el caso de una aproximación a segundo orden las expresiones para las series de Taylor de $f(x_i)$ son:

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3),$$

$$f(x_i) = f(x_i),$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \Delta x f'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{2} f''(x_i) + O(\Delta x^3),$$

y la combinación lineal usada para obtener una expresión de la segunda derivada es $f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})$. La expresión resultante es la siguiente:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2). \quad (3.2)$$

En este trabajo se usará la expansión de segundo orden para aproximar el Laplaciano en la ecuación de GP.

Condiciones de frontera

Al resolver una EDP es necesario proveer condiciones de frontera, las cuales determinan la manera en que el objeto que se estudia interactúa con el medio que lo rodea.

Existen diferentes condiciones de frontera que se pueden imponer a la EDP. En el caso de la ecuación de Schrödinger o GP conviene introducir el concepto de *esponja*; esto es, se define una región del dominio espacial que actúa como un extintor de partículas. La región de la esponja es definida en una parte del dominio cerca de la frontera numérica. La esponja es implementada con la finalidad de absorber los modos que al propagarse han llegado hasta las fronteras del dominio en el que se está calculando la solución y que se espera salgan del dominio [9].

Los efectos de una esponja se consiguen definiendo un potencial imaginario, como se muestra a continuación. Se considera la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi + V \Psi, \quad (3.3)$$

donde V es un potencial complejo. Se escribe el complejo conjugado de tal ecuación, que tiene la forma:

$$-i \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi^* + V^* \Psi^*. \quad (3.4)$$

Si el potencial es $V = V_{Re} + iV_{Im}$, multiplicando (3.3) por Ψ^* y (3.4) por Ψ se obtiene el

siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} i\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{1}{2}\Psi^* \nabla^2 \Psi + (V_{Re} + iV_{Im})\Psi\Psi^*, \\ -i\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} &= -\frac{1}{2}\Psi \nabla^2 \Psi^* + (V_{Re} - iV_{Im})\Psi\Psi^*, \end{aligned}$$

Restándolas:

$$i\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{1}{2}\Psi^* \nabla^2 \Psi - \frac{1}{2}\Psi \nabla^2 \Psi^* + 2iV_{Im}\Psi\Psi^*,$$

y usando la identidad $\nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*$, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial(\Psi\Psi^*)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\frac{i}{2}(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \right] = 2\Psi\Psi^* V_{Im}.$$

Cuando V es real se tiene la conservación de la densidad de probabilidad porque $V_{Im} = 0$; sin embargo, cuando tiene una parte imaginaria, la parte derecha es una fuente o un sumidero dependiendo de su signo [9]. Como se desea implementar una esponja en una región cercana a las fronteras, V_{Im} se elige con signo negativo. La forma que se eligió para la esponja es la siguiente:

$$V_{Im} = -\frac{1}{2}V_0 \left[2 + \tanh[(r - r_c)/\delta] - \tanh(r_c/\delta) \right], \quad (3.5)$$

con V_0 la profundidad de la esponja, r la coordenada radial $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, r_c es un radio a partir del cual inicia la esponja y δ es el tamaño de la región de transición. El signo negativo en la parte derecha de (3.5) se debe a que se está considerando que el potencial es un sumidero, si se considera que el signo es positivo se estaría pensando que el potencial es una fuente. En la Figura 3.1 se muestra la esponja en 1D con la función (3.5) en el dominio de -10 a 10 y la esponja 3D proyectada sobre un plano.

Con esta esponja, la densidad que se aproxime a las fronteras será absorbida en el sumidero y esto modelará un sistema aislado.

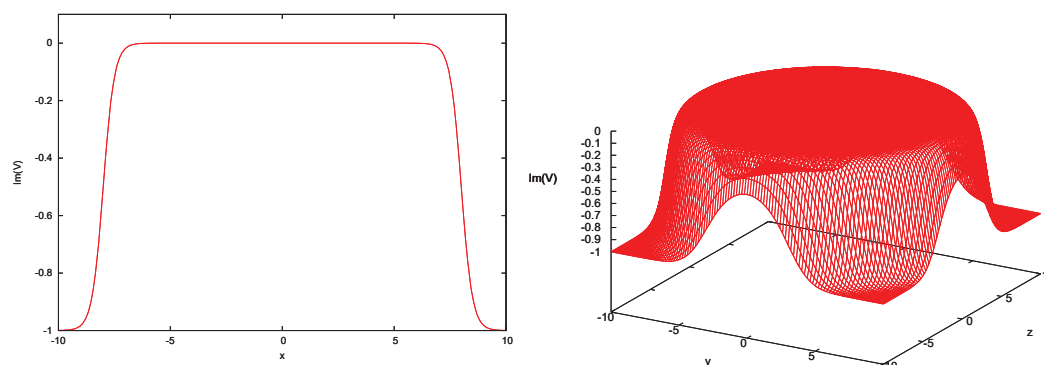


Figura 3.1: En la imagen de la izquierda se muestra la esponja en 1D para un dominio de -10 a 10 , con $\delta = 0.5$, $V_0 = 1$, $r_c = 8$. La función V_{Im} pasa de un valor negativo a cero donde no hay esponja y es donde ocurren los fenómenos físicos de interés, la parte que no es cero es donde está la esponja que va a absorber todos los modos que podrían rebotar de las fronteras. A la derecha se muestra una proyección de V_{Im} sobre el plano xy , utilizando los mismos parámetros que para el caso unidimensional.

3.2. Método de líneas

El método de diferencias finitas es un método general para resolver ED, se utiliza para resolver ecuaciones hiperbólicas, por ejemplo la ecuación de onda. Este método consiste en discretizar el dominio donde se define la ED y proporciona una versión discretizada de dicha ED. El método de líneas utiliza los elementos proporcionados por el método de diferencias finitas (discretizar el dominio y obtener la versión discretizada de la ED) para resolver EDs dependientes de t , asociadas a PVI como en la ecuación de GP; conociendo el valor de la función en un punto determinado a un tiempo dado, el método permite calcular el valor de esa función en ese punto al tiempo siguiente. El método sirve para solucionar PVI del tipo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = L(f),$$

donde L es un operador diferencial que con fines ilustrativos se considera de la siguiente forma:

$$L = \nabla^2 f + f, \quad (3.6)$$

aunque podría ser cualquier otro pero se ha elegido porque es parecido al operador de la ecuación de Schrödinger. El método de líneas se basa en la existencia de un dominio discreto, donde la ED asociada a un PVI se define en cada punto del dominio. Se escribe la ecuación (3.6) en una forma semidiscreta definida para el punto (t^n, x_i, y_j, z_k) ; es decir:

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{x_i, y_j, z_k, t^n} = L_{ijk}^n(f),$$

y L_{ijk}^n toma la forma, usando las aproximaciones en diferencias finitas de segundo orden:

$$L_{ijk}^n(f) = \frac{f_{i+1,j,k}^n - 2f_{i,j,k}^n + f_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1,k}^n - 2f_{i,j,k}^n + f_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2} + \frac{f_{i,j,k+1}^n - 2f_{i,j,k}^n + f_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2} + f_{i,j,k}^n$$

$$O(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2), \quad (3.7)$$

donde se ha usado el resultado (3.2), y aplicado a las derivadas parciales de f . Finalmente lo que se tiene es que la parte derecha de (3.7) es un número. Este número está definido como combinaciones de la función evaluada en distintos puntos alrededor de (x_i, y_j, z_k) , a saber, (x_{i+1}, y_j, z_k) , (x_{i-1}, y_j, z_k) , (x_i, y_{j+1}, z_k) , (x_i, y_{j-1}, z_k) , (x_i, y_j, z_{k+1}) y (x_i, y_j, z_{k-1}) y n es la etiqueta de un tiempo fijo. Para ilustrar lo anterior véase la Figura 3.2. La parte esencial del método de líneas es que la ecuación (3.7) es una ecuación diferencial ordinaria en el tiempo y se resuelve con un método numérico que resuelve EDOs, por ejemplo el método de Euler, Backward Euler, el método del trapecio, los métodos Runge-Kutta (RK) y aproximaciones de DF de segundo orden. Para este trabajo se eligió el RK de tercer orden debido a que para este trabajo aporta un buen grado de aproximación y es fácil de implementar.

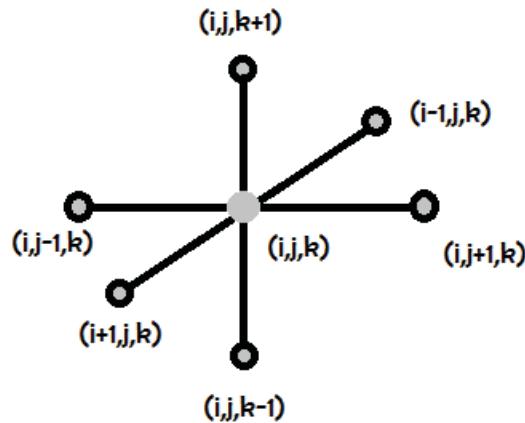


Figura 3.2: Aquí se muestra una célula computacional tridimensional.

El método Runge-Kutta de tercer orden (RK3) se utiliza para resolver el problema de

valor inicial en cada (x_i, y_j, z_k) del tipo

$$\begin{cases} \frac{df}{dt} = L(f) \\ f(0) = f_0 \end{cases},$$

de t^n a t^{n+1} .

El RK3 consiste en discretizar el dominio en el cual se va a resolver el problema y mediante expansiones en series de Taylor, f^{n+1} toma la forma:

$$f^{n+1} = f^n + (a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3) \Delta t,$$

donde a_1, a_2 y a_3 son constantes y k_1, k_2 y k_3 corresponden a las derivadas df/dt evaluadas en distintos puntos del intervalo $[t^n, t^{n+1}]$. Éstas últimas son relaciones de recurrencia ya que el k_2 depende de k_1 y el de k_3 de k_2 ; y están dadas como sigue:

$$\begin{aligned} k_1 &= L(f^n), \\ k_2 &= L\left(f^n + \frac{1}{2} k_1 \Delta t\right), \\ k_3 &= L\left(f^n - (k_1 - 2k_2) \Delta t\right). \end{aligned}$$

Entonces la solución está determinada por:

$$f^{n+1} = f^n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3) \Delta t,$$

donde $a_1 = 1/6, a_2 = 4/6, a_3 = 1/6$.

El RK3 posee un error local de cuarto orden ($O(\Delta t^4)$) y un error global de tercer orden ($O(\Delta t^3)$). Este método basta porque se usan Diferencias Finitas de orden 2 en las partes derechas de la ecuación (3.7) y así el error dominante es el de la discretización espacial, como las ecuaciones que se están resolviendo con el método RK son las que dependen del tiempo lo que se requiere para aumentar la precisión es aumentar la resolución de la malla espacial.

Refinamientos de la malla

En todos los problemas que se resuelven empleando métodos numéricos se busca obtener la mejor aproximación a la solución en el continuo, por lo que en algunos casos una única resolución sobre la malla no es capaz de ofrecer la precisión buscada. Esto se soluciona empleando *niveles de refinamiento* sobre la malla, es decir, se definen dominios que son subconjuntos del dominio original D , en tales dominios de la malla la resolución es mayor y al tener $\Delta x, \Delta y$ y Δz menores el método numérico empleado es capaz de ofrecer

una solución más precisa. Así para nuestro propósito la precisión requerida al resolver un sistema de ecuaciones de evolución, se logra usando dominios con distintas resoluciones. Se usará mejor resolución en el centro de la trampa, que es donde se espera que se concentren los átomos del gas. Con fines de ilustrar la idea de los refinamientos se toma el caso unidimensional y como ejemplo la ecuación de onda [10].

La malla sobre la que se realizan los refinamientos se define igualmente espaciada con resolución Δx . Los dominios D_1, D_2, \dots, D_m , donde m es el número de dominios que se consideran, son conjuntos que cumplen con $D_m \subset D_{m-1} \subset \dots \subset D_1 \subset D$. Por simplicidad la resolución en el dominio D_m es el doble de la de D_{m-1} , y así el sistema de ecuaciones se discretiza en cada dominio usando resoluciones $\frac{\Delta x}{2^1}, \frac{\Delta x}{2^2}, \dots, \frac{\Delta x}{2^m}$ respectivamente. En cada dominio se resuelven las funciones de la ED obteniendo sus respectivas soluciones, una representación de estos dominios aparecen en la Figura 3.3.

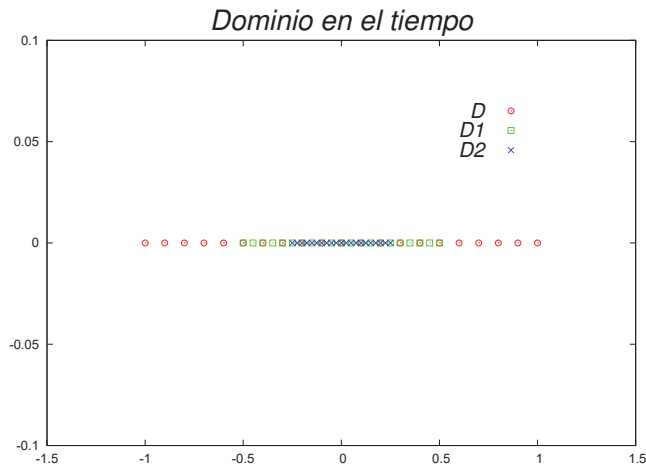


Figura 3.3: En esta imagen se aprecia cómo los dominios con mayor resolución están contenidos en los sucesivos de menor resolución para tres niveles de refinamiento y un tiempo fijo t^n .

La idea del funcionamiento del algoritmo es como sigue. Se consideran los dominios D_i y D_{i+1} que cumplen $D_i \subset D_{i+1}$; en cada paso de tiempo se calcula una solución en un D_i pequeño con un buen grado de precisión, después se copia dicha solución a D_{i+1} por lo que la solución en D_{i+1} también tiene un buen grado de precisión. El método es conocido como refinamiento de Berger-Oliger [11] y aquí se describe.

Al discretizar la ecuación de onda aparece un parámetro que debe ser tomado en cuenta, es el factor $C = \Delta t / \Delta x$; es importante ya que determina el tamaño del paso de tiempo para los dominios, es decir, si la relación de D_{i+1} a D_i entre resoluciones es de $1/2$, entonces el paso de tiempo para la resolución de D_i también es de $1/2$. Es importante tener en cuenta que las funciones involucradas en el sistema de ecuaciones evolucionan de forma independiente en cada dominio.

Lo que ocurre en cada paso completo de tiempo tomando dos niveles de refinamiento, es decir, usando los dominios D_1 y D_2 con resoluciones $\Delta x/2$ y $\Delta x/4$ respectivamente, es:

- Se consideran los valores de las funciones que están dentro del dominio D al tiempo t^n y mediante el método de líneas se calculan los valores de estas funciones al tiempo t^{n+1} ,
- se consideran los valores de las funciones en los puntos contenidos en D_1 y empleando nuevamente el método de líneas para calcular los valores de las funciones en los mismos puntos pero en los tiempos $t^{n+1/2}$ y t^{n+1} ,
- para los valores de las funciones en los puntos que están dentro del dominio D_2 los pasos a seguir son análogos a los descritos en 1 y 2 utilizando 4 pasos de tiempo, es decir, $t^{n+1/4}$, $t^{n+1/2}$, $t^{n+3/4}$ y t^{n+1} ,
- los valores de las funciones definidas en los puntos que cumplen $(D \cap D_1)$ se copian al tiempo t^{n+1} .
- se copian los valores de las funciones calculados sobre los puntos de D_2 que coinciden con los puntos de D_1 en el tiempo t^{n+1} ,
- finalmente se comienzan nuevamente los pasos anteriores, de tal manera que t^{n+1} ahora será t^n .

Una dificultad que tiene este proceso durante su evolución es que los dominios que tienen resoluciones mas pequeñas no poseen fronteras reales y por lo tanto las condiciones de frontera no pueden ser aplicadas. Una forma de solucionarlo es seguir el método de Berger-Oliger [11] y crear puntos en ese dominio denominados *puntos fantasma* cuya función es almacenar los valores de las funciones hasta los puntos requeridos por el integrador RK3 usado. Los valores de las funciones en los puntos fantasma se calculan de la siguiente manera:

- Para los tiempos t^n y t^{n+1} los valores de las funciones en los puntos fantasma se calculan mediante una interpolación de segundo orden entre puntos vecinos que se encuentran a los tiempos t^n y t^{n+1} respectivamente.
- Para calcular los valores en los puntos fantasma al tiempo $t^{n+1/2}$ se hace usando una interpolación bilineal (una promedio entre valores de puntos al tiempo t^n y al tiempo t^{n+1} si la región entre resoluciones es $1/2$).

Una representación de lo anterior se puede ver en la Figura 3.4.

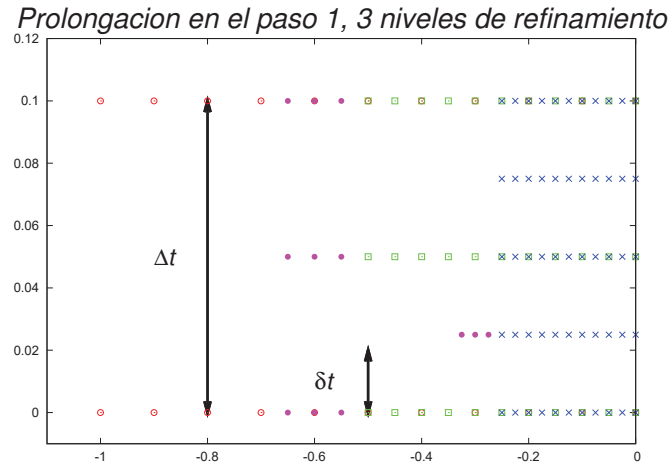


Figura 3.4: Se muestra el esquema del funcionamiento del algoritmo para tres niveles de refinamiento en el primer paso de tiempo, los puntos están igualmente espaciados. Aquí también se pueden apreciar los puntos fantasma creados en cada dominio.

3.3. Implementación y pruebas con soluciones exactas

Para verificar que el código que se ha construido calcula la solución correcta de la EDP de nuestro interés, en este caso la ecuación de GP, realizamos pruebas con soluciones exactas. La ecuación de GP es la ecuación de Schrödinger (aunque con una interpretación macroscópica) pero es matemáticamente la misma y se conocen soluciones exactas, tal es el caso de la partícula en una caja y la partícula con un potencial de oscilador armónico.

3.4. Partícula en una caja

La prueba básica es la de una partícula dentro de una caja. Dentro de la caja la partícula puede moverse libremente, sin embargo, cuando la partícula está cerca de las fronteras de la caja un potencial infinito evita que pueda salir [12].

Realizar esta prueba es importante porque dará las bases para los casos que se estudiarán en las secciones siguientes. En esta sección se calculará la solución exacta y se construirá una solución numérica empleando los métodos numéricos descritos antes.

3.4.1. Solución exacta

Para calcular la solución exacta se considera la ecuación de Schrödinger,

$$i \frac{\partial \Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z) \Psi(x, y, z, t),$$

donde se han definido $\hbar = m = 1$ y el potencial como:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & (x, y, z) \in D \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases}, \quad (3.8)$$

dado $D = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}]$. Así tenemos que la probabilidad de encontrar la partícula fuera de D es nula ($\Psi(x, y, z, t) = 0$), mientras que dentro de la caja el potencial es cero, entonces la ecuación de Schrödinger es la de la partícula libre:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\Psi. \quad (3.9)$$

La frontera de D juega el papel de las paredes de la caja, así las condiciones de frontera son $\Psi(x = x_{min}, y, z, t) = \Psi(x = x_{max}, y, z, t) = 0$, $\Psi(x, y = y_{min}, z, t) = \Psi(x, y = y_{max}, z, t) = 0$ y $\Psi(x, y, z = z_{min}, t) = \Psi(x, y, z = z_{max}, t) = 0$.

Para resolver la ecuación (3.9) se propone una solución de la forma $\Psi(x, y, z, t) = \exp(-iEt)X(x)Y(y)Z(z)$, por lo que se tienen tres ecuaciones ordinarias separadas:

$$\begin{aligned} \frac{d^2X(x)}{dx^2} + 2\alpha^2X(x) &= 0, \\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + 2\beta^2Y(y) &= 0, \\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + 2\gamma^2Z(z) &= 0, \end{aligned}$$

y la energía cumple con la condición $E = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2$ sobre las constantes de integración. Aplicando las condiciones de frontera a Ψ se llega a la solución para la parte estacionaria de (3.9)

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A_{n_x} A_{n_y} A_{n_z} \sin(n_x \pi x) \sin(n_y \pi y) \sin(n_z \pi z)$$

con los valores permitidos de energía

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{(n_x \pi)^2}{2} + \frac{(n_y \pi)^2}{2} + \frac{(n_z \pi)^2}{2},$$

donde $n_x = 0, 1, 2, \dots$, $n_y = 0, 1, 2, \dots$ y $n_z = 0, 1, 2, \dots$ son números cuánticos. Posteriormente se normaliza la función de onda con la siguiente condición:

$$\int_D \Psi^* \Psi d^3x = 1,$$

y se obtiene finalmente la solución completa de la ecuación de Schrödinger:

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z, t) = \sqrt{8} \exp^{-iE_{n_x, n_y, n_z} t} \sin(n_x \pi x) \sin(n_y \pi y) \sin(n_z \pi z), \quad (3.10)$$

Una propiedad de las soluciones estacionarias es que su dependencia temporal es armónica por ello una cantidad importante a monitorear es la densidad de probabilidad:

$$\rho = \Psi^* \Psi = 8 \sin^2(n_x \pi x) \sin^2(n_y \pi y) \sin^2(n_z \pi z), \quad (3.11)$$

que es una función independiente del tiempo. Esto es muy importante para verificar las soluciones numéricas.

3.4.2. Solución numérica

Para resolver numéricamente la ecuación (3.9) se requiere una versión discretizada de ésta, dicha discretización se describe a continuación.

Se considera la función de onda como una función compleja que tiene la forma $\Psi = \Psi_{Re} + i\Psi_{Im}$, sustituyendo en (3.9) se obtienen dos ecuaciones, una para la parte real y otra para la parte imaginaria de Ψ en el dominio $D = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}] \times [z_{min}, z_{max}]$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_{Re}}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{Re} \\ \frac{\partial \Psi_{Im}}{\partial t} &= \frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{Im} \end{aligned}$$

Y la ecuación en su forma semi-discreta es para las partes real e imaginaria:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_{Re}}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\Psi_{i+1,j,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} - \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i,j+1,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2} \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i,j,k+1}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2} \\ \frac{\partial \Psi_{Im}}{\partial t} &= \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i+1,j,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i,j+1,k}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\Psi_{i,j,k+1}^n - 2\Psi_{i,j,k}^n + \Psi_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2} \end{aligned}$$

que es la expresión explícita usada para aplicar el método de líneas. La resolución de la

mallas donde se resolverá la ecuación se define como:

$$\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x}, \quad (3.12)$$

$$\Delta y = \frac{y_{max} - y_{min}}{N_y}, \quad (3.13)$$

$$\Delta z = \frac{z_{max} - z_{min}}{N_z}, \quad (3.14)$$

donde N_x , N_y , N_z representan el número de puntos que tendrá la malla en cada dirección espacial. Para la parte temporal el dominio está definido $[t_{min}, t_{max}]$, donde se toma $t_{min} = 0$. La resolución temporal es Δt y se define a través del factor $C = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ similar al de Courant para ecuaciones hiperbólicas, y cuyo valor se utiliza para calcular Δt adecuados para que el modelo sea estable, $C < \frac{1}{2}$.

3.4.3. Prueba

La prueba se hizo sobre el dominio numérico $D = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, el cual se discretiza usando 100 puntos en cada dirección espacial, $N_x = N_y = N_z = 100$, con resolución $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.01$ y se evoluciona hasta $t = 10$. Se usa la solución (3.10) al tiempo inicial $t = 0$ como condición inicial de la EDP y se imponen condiciones de frontera $\Psi = 0$ en la frontera de D en todas las caras del dominio. Esta condición de frontera es la adecuada para este problema porque la ecuación (3.8) implica que $\Psi = 0$ fuera de D y la continuidad de Ψ exige que fuera del dominio ésta sea cero. De esta manera se inicia la evolución del sistema empleando el método de líneas.

En la Figura 3.5 se muestra Ψ_{Re} en la dirección de y con $n_x = n_y = n_z = 2$ (en las otras direcciones la gráfica es la misma debido a que tienen el mismo número de nodos), lo que permite ver cómo evoluciona Ψ a lo largo de dicho eje, por otra parte, la densidad de probabilidad ρ en la misma dirección, y , permite observar cómo cambia a medida que evoluciona la función de onda y se puede ver que la gráfica de ρ en ese mismo eje cambia ligeramente en un intervalo pequeño, lo que confirma que ρ es independiente del tiempo, salvo por errores numéricos.

Además en la Figura 3.6 se muestra que la $N = \int_D \rho dx \approx 1$ durante el tiempo de evolución, el hecho de que no se mantenga igual a 1 es debido a que el método numérico sólo calcula una aproximación como se mencionó antes y por tanto tiene asociado un error. En las gráficas mostradas en ambas figuras se utiliza un sólo nivel de refinamiento.

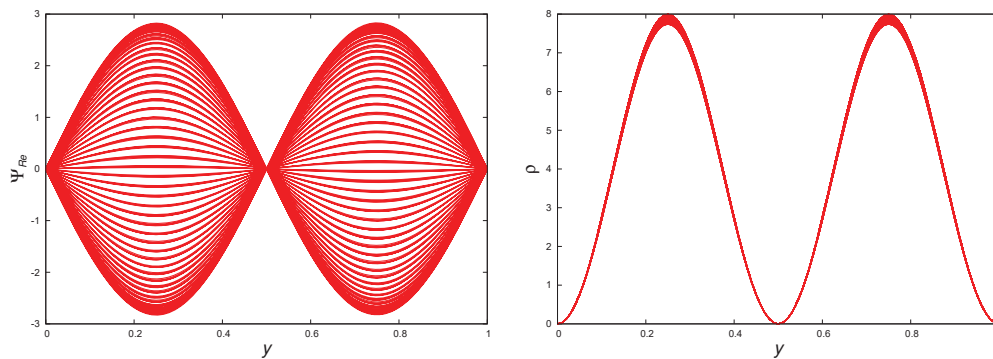


Figura 3.5: En la primer gráfica se muestra la parte real de la función de onda correspondiente a la partícula en una caja a lo largo del eje y con dos nodos, $n_x = n_y = n_z = 2$; mientras que, en la segunda se muestra la densidad de probabilidad $\rho = \Psi\Psi^*$ en la misma dirección. En ambas gráficas se utilizó un nivel de refinamiento.

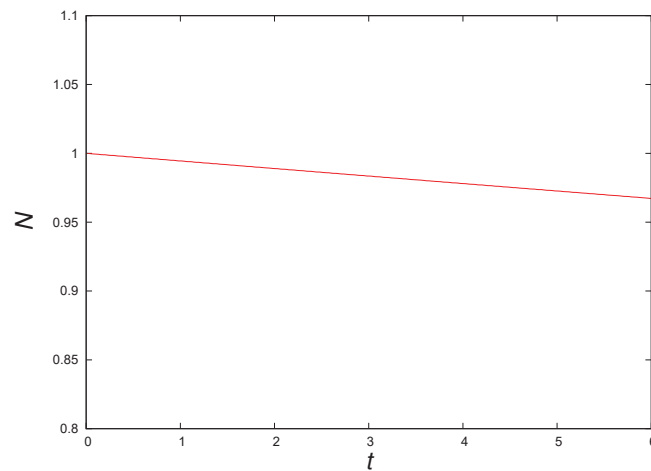


Figura 3.6: La gráfica presenta $N = \int \int \int_D \rho d^3x$ vs t . Se puede observar que esta cantidad no permanece constante debido a la resolución que se está utilizando, al aumentar la resolución, la pendiente de la recta disminuye y se acerca a los resultados esperados.

3.5. Partícula en un potencial de oscilador armónico isotrópico

En esta sección se considera una partícula dentro de un potencial de oscilador armónico. Así como se presenta la solución exacta al problema y una solución numérica con sus respectivas pruebas. Como se considera el problema cuántico se tiene que resolver la ecuación de Schrödinger y no la ley de Hooke [12].

Solución exacta

Para este caso la partícula dentro de un dominio D se encuentra sometida a un potencial de oscilador armónico donde las constantes de resorte son iguales en las tres direcciones espaciales:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2).$$

Con este potencial la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$i\frac{\partial\Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}\nabla^2\Psi(x, y, z, t) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)\Psi(x, y, z, t), \quad (3.15)$$

donde se han usado unidades $\hbar = m = \omega = 1$. Este problema también tiene solución exacta, la ecuación se resuelve por separación de variables proponiendo una solución de la forma $\Psi(x, y, z, t) = \exp(-iEt)X(x)Y(y)Z(z)$ y sustituyendo en la ecuación (3.15),

$$2E = -\frac{1}{X(x)}\frac{dX(x)}{dx} - \frac{1}{Y(y)}\frac{dY(y)}{dy} - \frac{1}{Z(z)}\frac{dZ(z)}{dz} + x^2 + y^2 + z^2, \quad (3.16)$$

de aquí se tienen tres ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{d^2X(x)}{dx^2} + (2\alpha^2 - x^2)X(x) &= 0, \\ \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + (2\beta^2 - y^2)Y(y) &= 0, \\ \frac{d^2Z(z)}{dz^2} + (2\gamma^2 - z^2)Z(z) &= 0, \end{aligned}$$

donde la energía cumple con la condición $E = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2$. Resolviendo cada una de las ecuaciones anteriores, como se hace con el problema de la partícula en un oscilador armónico en una dimensión [12]. Se obtiene la solución a la ecuación (3.16):

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A_{n_x} A_{n_y} A_{n_z} \exp\left(\frac{-(x^2 + y^2 + z^2)}{2}\right) H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(z),$$

donde $H_{n_x}(x)$, $H_{n_y}(y)$ y $H_{n_z}(z)$ son los polinomios de Hermite. Además la energía del sistema cumple con:

$$E_{n_x n_y n_z} = n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2},$$

donde $n_x = 0, 1, 2, \dots$, $n_y = 0, 1, 2, \dots$ y $n_z = 0, 1, 2, \dots$ son enteros que etiquetan los valores permitidos de la energía. Finalmente al normalizar los polinomios de Hermite se obtienen las amplitudes A_{n_x} , A_{n_y} , A_{n_z} con lo cual se obtiene la solución completa del problema:

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{3/2} 2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \exp(-iE_{n_x, n_y, n_z} t) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2}\right) H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(z), \quad (3.17)$$

y la densidad de probabilidad tiene la forma:

$$\rho = \Psi\Psi^* = \frac{1}{\pi^{3/2} 2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!} \exp\left(-\left(x^2 + y^2 + z^2\right)\right) H_{n_x}^2(x) H_{n_y}^2(y) H_{n_z}^2(z), \quad (3.18)$$

la densidad de probabilidad se calcula con la finalidad de determinar las consistencia de la solución numérica.

Solución numérica

Para resolver la ecuación (3.15) necesitamos una versión discreta de ésta, dicha discretización se hace una vez más considerando la función de onda $\Psi(x, y, z, t)$ como una función compleja que tiene la forma $\Psi = \Psi_{Re} + i\Psi_{Im}$, de forma análoga hacemos la misma consideración para el potencial $V = V_{Re} + iV_{Im}$ y sustituimos en (3.15) de donde obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_{Im}}{\partial t} &= \frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{Re} + (V_{Im} \Psi_{Im} - V_{Re} \Psi_{Re}), \\ \frac{\partial \Psi_{Re}}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_{Im} + (V_{Re} \Psi_{Im} - V_{Im} \Psi_{Re}). \end{aligned}$$

La discretización de las ecuaciones se hace de forma similar que para la partícula en una caja, la única diferencia es que se le suman los términos que contienen el potencial. Las ecuaciones anteriores deben ser escritas en su forma semi-discreta para poder ser resueltas con el método de líneas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_{Re}}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\Psi_{Im}(i+1, j, k, n) - 2\Psi_{Im}(i, j, k, n) + \Psi_{Im}(i-1, j, k, n)}{\Delta x^2} \\ &+ \frac{\Psi_{Im}(i, j+1, k, n) - 2\Psi_{Im}(i, j, k, n) + \Psi_{Im}(i, j-1, k, n)}{\Delta y^2} \\ &+ \frac{\Psi_{Im}(i, j, k+1, n) - 2\Psi_{Im}(i, j, k, n) + \Psi_{Im}(i, j, k-1, n)}{\Delta z^2} \\ &+ V_{Re}(i, j, k) \Psi_{Im}(i, j, k, n) - V_{Im}(i, j, k) \Psi_{Re}(i, j, k, n) \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi_{Im}}{\partial t} = & \frac{1}{2} \frac{\Psi_{Re}(i+1, j, k, n) - 2\Psi_{Re}(i, j, k, n) + \Psi_{Re}(i-1, j, k, n)}{\Delta x^2} \\
& + \frac{\Psi_{Re}(i, j+1, k, n) - 2\Psi_{Re}(i, j, k, n) + \Psi_{Re}(i, j-1, k, n)}{\Delta y^2} \\
& + \frac{\Psi_{Re}(i, j, k+1, n) - 2\Psi_{Re}(i, j, k, n) + \Psi_{Re}(i, j, k-1, n)}{\Delta z^2} \\
& + V_{Re}(i, j, k)\Psi_{Re}(i, j, k, n) - V_{Im}(i, j, k)\Psi_{Im}(i, j, k, n) \quad (3.20)
\end{aligned}$$

La resolución de la malla esta dada por las ecuaciones (3.12), (3.13) y (3.14); el factor de evolución C se define como $C < \frac{1}{2^3}$.

Pruebas

La ecuación se resolvió en el dominio $D = [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8]$ con $N_x = N_y = N_z = 128$, D fue discretizado de la misma forma que para el caso anterior usando una resolución de $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$, el factor de evolución se definió con un valor de $C = 0.125$ y el código evolucionó hasta $t = 50$. Para este problema la condición inicial está dada por la solución exacta (3.17) al tiempo inicial $t = 0$; las pruebas fueron hechas con uno, dos y tres niveles de refinamiento; el dominio con dos niveles de refinamiento es $[-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4]$ y $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$, y para tres niveles de refinamiento el dominio es $[-3.2, 3.2] \times [-3.2, 3.2] \times [-3.2, 3.2]$ con resolución $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.05$.

Prueba 1

En la Figura 3.7 se muestra la parte real de la función de onda Ψ y la densidad de probabilidad $\rho = \Psi\Psi^*$ para $n_x = n_y = n_z = 0$ durante el tiempo de evolución para un primer nivel de refinamiento a lo largo del eje y , mientras que en la Figura 3.8 se muestran las gráficas para dos niveles de refinamiento. En ambas Figuras se puede observar que Ψ sigue el perfil de una gaussiana centrada en el origen y al evolucionar en el tiempo sigue presentando este perfil con un cambio en la amplitud. Por otra parte, ρ al igual que Ψ sigue un comportamiento gaussiano pero al evolucionar en el tiempo, se observa que la amplitud está cambiando dentro de un intervalo pequeño a pesar de que en el caso ideal debería permanecer sin cambio. Si comparamos las gráficas a la derecha de las Figuras 3.7 y 3.8 se aprecia que las oscilaciones son menores en la Figura 3.8 pues se usa una mayor resolución en la región central del dominio. Este es el objetivo de usar refinamiento de mallas y una prueba de que el código implementado funciona correctamente.

La Figura 3.9 presenta la evolución de Ψ_{Re} y $\int_D \rho dx$ en el tiempo usando tres niveles de refinamiento, para el tercer nivel de refinamiento la gráfica presenta ligeras oscilaciones.

Esto se debe a que al definir el dominio para este nivel es posible que una parte de la Gaussiana haya quedado fuera de dicho dominio y por tanto el error que presenta al calcular la solución es mayor que cuando se usan dos niveles de refinamiento. Este ejemplo ilustra que el refinamiento de mallas también tiene limitaciones.

Se espera que la integral de la densidad en el tiempo tenga un valor igual a uno, lo cual indica que Ψ es independiente del tiempo, pero al observar la gráfica vemos que no se cumple dicha predicción debido a que las curvas tienen una pendiente distinta de cero producida por el error asociado al método numérico asociado, la correspondiente a los dos niveles de refinamiento tiene un pendiente menor por lo que con este nivel de refinamiento la aproximación es mejor.

El error porcentual de $\int \rho dt$ después de que Ψ hizo 10 oscilaciones, es decir en $t = 50$ para un nivel de refinamiento es de 3.8 % mientras que para dos niveles el error es de 0.5 %.

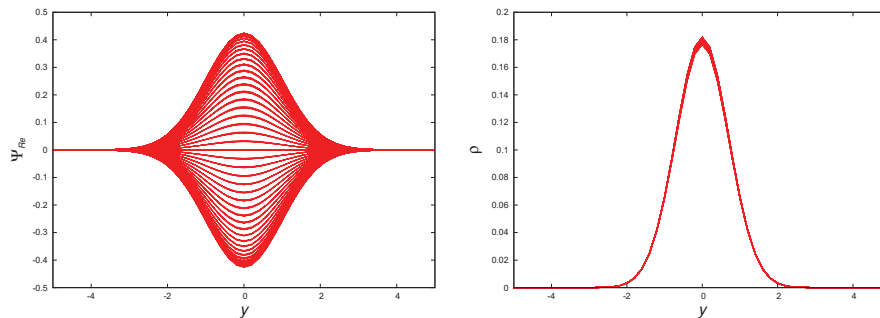


Figura 3.7: Se muestra la evolución de Ψ_{Re} y ρ para un nivel de refinamiento con $n_x = n_y = n_z = 0$ y $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$ a lo largo del eje y . Se aprecia que la función de onda presenta un perfil gaussiano dependiente del tiempo y ρ permanece casi independiente del tiempo.

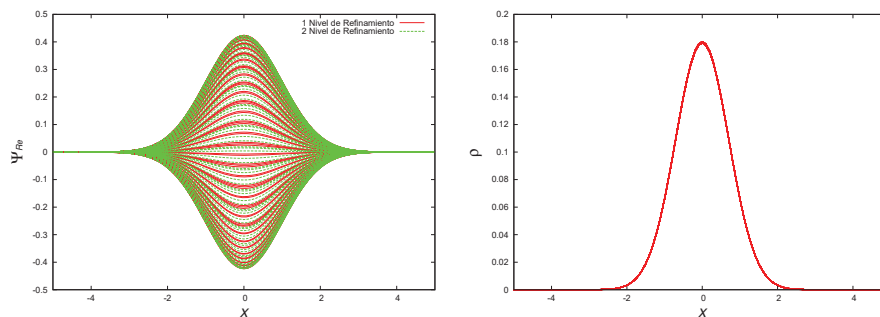


Figura 3.8: Se muestra la evolución de la función de onda y la densidad de probabilidad para dos niveles de refinamiento, $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$ en el primero y $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$ en el segundo. En este caso las variaciones de ρ son menores que en el caso anterior, lo cual prueba la eficacia del uso de refinamientos.

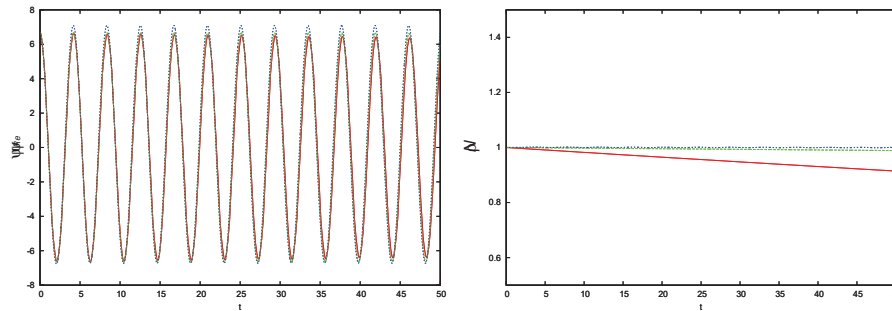


Figura 3.9: La gráfica de la izquierda muestra el valor central de Ψ_{Re} a lo largo del tiempo, mientras la gráfica de la de derecha muestra $N = \int_D \rho d^3x$ vs t , se ve que con un nivel de refinamiento la pendiente es mayor que la pendiente de la curva que es generada cuando se usan dos niveles de refinamiento, mientras que para tres niveles de refinamiento la curva generada no es una recta, es decir, la curva tiene ligeras oscilaciones.

Prueba 2

Al igual que en la prueba anterior se graficó la evolución de la función de onda en los tres ejes considerando los valores $n_x = 4$, $n_y = 0$ y $n_z = 2$; el perfil que tendrá la función de onda Ψ en el tiempo sigue un comportamiento oscilante. En la Figura 3.10 vemos la evolución de Ψ_{Re} y de ρ durante el tiempo de evolución a lo largo de cada uno de los ejes coordenados. La prueba se hizo para dos niveles de refinamiento.

Por otra parte, en la Figura 3.11 se muestra la función de onda y la densidad de probabilidad, ρ , proyectadas en el plano xy a distintos tiempo con un nivel de refinamiento, se puede observar claramente cómo la función de onda cambia de un tiempo al siguiente, mientras que ρ se mantiene aproximadamente constante.

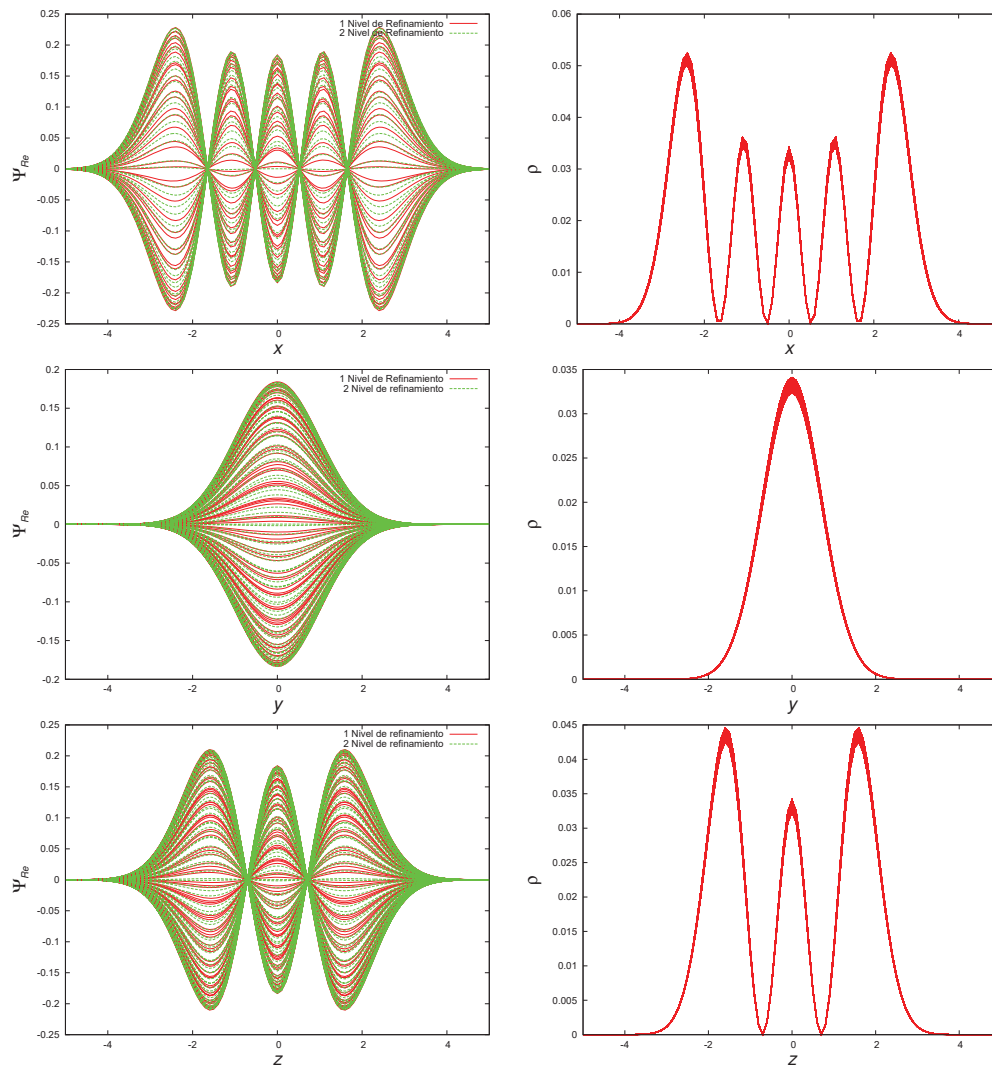


Figura 3.10: Muestra la gráfica de Ψ_{Re} , la cual oscila mientras la densidad de probabilidad se mantiene cercana a la independencia temporal y presenta cambios que se encuentran oscilando dentro de un intervalo pequeño. Estas gráficas corresponden al caso $n_x = 4$, $n_y = 0$ y $n_z = 2$. Las gráficas obtenidas fueron calculadas con dos niveles de refinamiento.

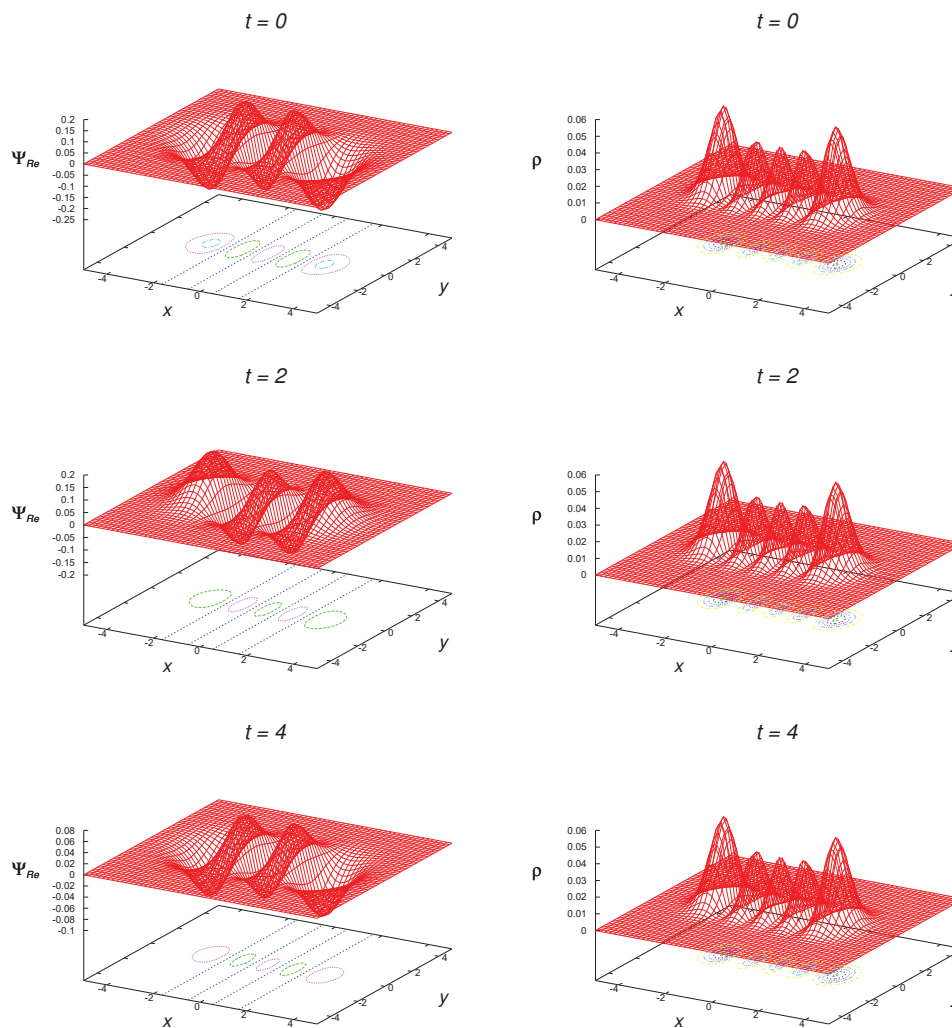


Figura 3.11: Muestra las gráficas de la función de onda y de la densidad de probabilidad proyectadas en el plano xy para el caso $n_x = 4$, $n_x = 0$ y $n_x = 2$ para los tiempo $t = 0, 2, 4$. Se observa que la densidad de probabilidad se mantiene aproximadamente independiente del tiempo durante el tiempo de evolución.

3.6. Partícula en un potencial de oscilador armónico anisotrópico

3.6.1. Solución exacta

La evolución de la función de onda $\Psi(x, y, z, t)$ para este caso es descrita por la ecuación de Schrödinger, donde la partícula está sometida al potencial de la forma:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + \epsilon z^2).$$

Para resolver la ecuación se separa y propone una solución de la forma $\Psi(x, y, z, t) = \exp(-iEt)X(x)Y(y)Z(z)$, dicha solución se sustituye en la ecuación de Schrödinger y se obtienen las siguientes tres ecuaciones ordinarias:

$$\frac{d^2 X(x)}{dx^2} - X(x)(x^2 - 2\alpha^2) = 0, \quad (3.21)$$

$$\frac{d^2 Y(y)}{dy^2} - Y(y)(y^2 - 2\beta^2) = 0, \quad (3.22)$$

$$\frac{d^2 Z(z)}{dz^2} - Z(z)(\epsilon z^2 - 2\gamma^2) = 0, \quad (3.23)$$

donde $E = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2$. Aplicando las condiciones de frontera de Ψ a las ecuaciones (3.21) y (3.22) conocemos su solución ya que se trata de la ecuación del oscilador armónico unidimensional:

$$X_{n_x}(x) = A_{n_x} e^{-x^2/2} H_{n_x}(x),$$

$$Y_{n_y}(y) = A_{n_y} e^{-y^2/2} H_{n_y}(y),$$

donde H_{n_x} y H_{n_y} son los polinomios de Hermite. Para resolver la EDO (3.23) se define una nueva variable $\tilde{z} = \sqrt{\epsilon}z$ y sustituyendo se obtiene:

$$Z_{n_z}(\tilde{z}) = A_{n_z} e^{-\tilde{z}^2/2} H_{n_z}(\tilde{z}).$$

Regresando a la variable original se encuentra que la solución es:

$$Z_{n_z}(z) = A_{n_z} e^{-\epsilon z^2/2} H_{n_z}(\sqrt{\epsilon}z),$$

Finalmente la solución para la parte estacionaria es:

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A_{n_x} A_{n_y} A_{n_z} \exp(-(x^2 + y^2 + \epsilon z^2)/2) H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(\sqrt{\epsilon}z),$$

donde la energía toma los valores:

$$E_{n_x n_y n_z} = (n_x + \frac{1}{2}) + (n_y + \frac{1}{2}) + \epsilon(n_z + \frac{1}{2}),$$

con $n_x = 0, 1, 2, \dots$, $n_y = 0, 1, 2, \dots$ y $n_z = 0, 1, 2, \dots$ son números cuánticos que etiquetan los valores permitidos de la energía. Después de normalizar los polinomios de Hermite se

obtiene la solución completa:

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\epsilon} \pi^{3/2} 2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \exp(-iE_{n_x n_y n_z} t) \exp(-(x^2+y^2+\epsilon z^2)/2) H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(\sqrt{\epsilon} z). \quad (3.24)$$

La densidad de probabilidad $\rho = \Psi^* \Psi$ cumple con la propiedad de permanecer independiente del tiempo ya que su solución es estacionaria como era de esperarse. Es decir, se ha construido aquí las soluciones estacionarias para un potencial anisotrópico.

3.6.2. Pruebas

La forma semi-discreta de las ecuaciones que describen este problema son análogas a las del caso anterior. Se considera el dominio $[-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8]$, con resolución $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$ para el primer nivel de refinamiento, para el segundo nivel de refinamiento el dominio es $[-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4]$ y una resolución $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$; para este caso se define el coeficiente $C = 0.1$ y el sistema es evolucionado hasta $t = 50$.

La condición inicial esta dada por la ecuación (3.24) al tiempo inicial $t = 0$. Se elige el valor de $\epsilon = 2$ y el efecto que tiene es el de alargar el potencial del oscilador a lo largo de la dirección z , un efecto que deseamos simular, puesto que en la construcción del BEC de Rb-87 la trampa es alargada.

Prueba 1

En esta primera prueba se observa la evolución de la función de onda Ψ y de la densidad de probabilidad para $n_x = n_y = n_z = 0$ cuando se agrega el efecto de la anisotropía al potencial. En la Figura 3.12 se muestra Ψ_{Re} y ρ para dos niveles de refinamiento a lo largo de los ejes x y z . En esta gráfica se puede observar que Ψ tiene un perfil de una gaussiana centrada en el origen que evoluciona en el tiempo, mientras que ρ presenta un perfil análogo pero durante la evolución su amplitud cambia dentro de un intervalo pequeño de tiempo; para ver con más claridad el efecto de la anisotropía en la solución se muestra la Figura 3.13, cuyas isocurvas nos ayudan a visualizar que efectivamente la densidad en el eje z es más grande.

En la Figura (3.14) se muestra del lado izquierdo el valor central de Ψ_{Re} en el tiempo y a la derecha $N = \int_D \rho d^3x$ a lo largo del tiempo, ambas para uno y dos niveles de refinamiento. Se comprueba nuevamente que la recta para N correspondiente a dos niveles de refinamiento tiene una pendiente menor que la que corresponde a un nivel de refinamiento.

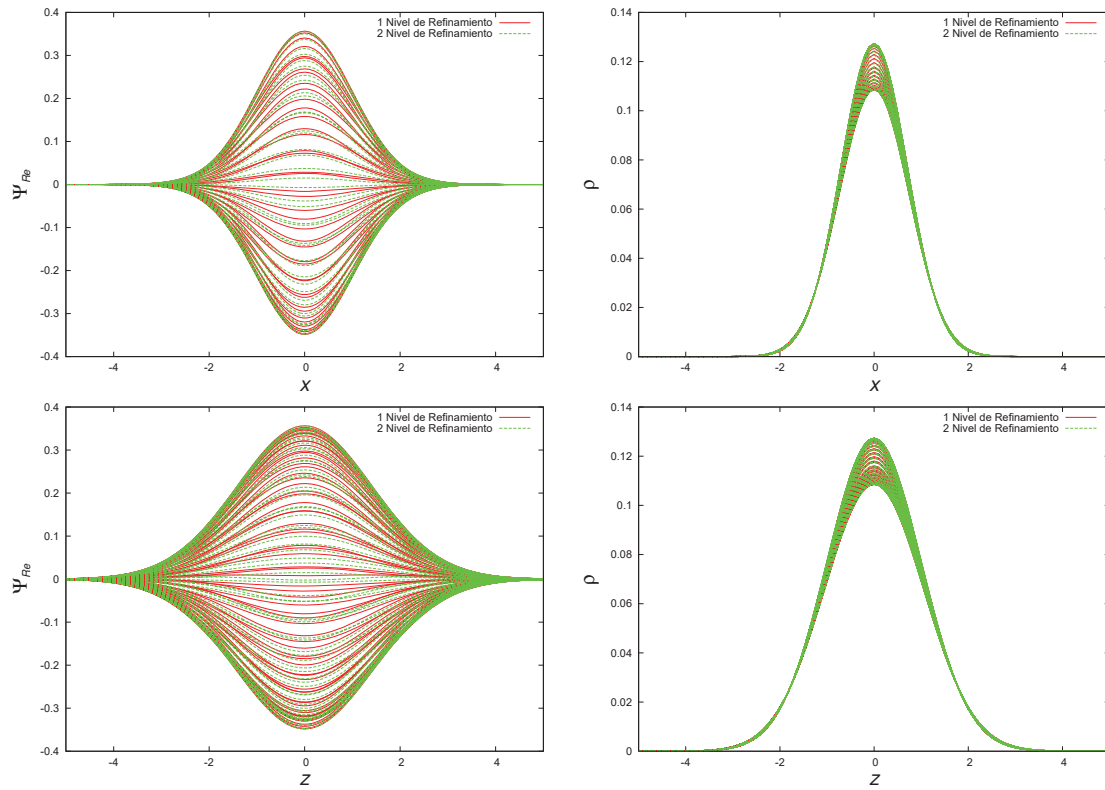


Figura 3.12: En esta gráfica se muestra a Ψ_{Re} y a ρ a lo largo de los tres ejes coordenados para el caso estacionario, $n_x = n_y = n_z = 0$. Las gráficas obtenidas fueron calculadas con dos niveles de refinamiento.

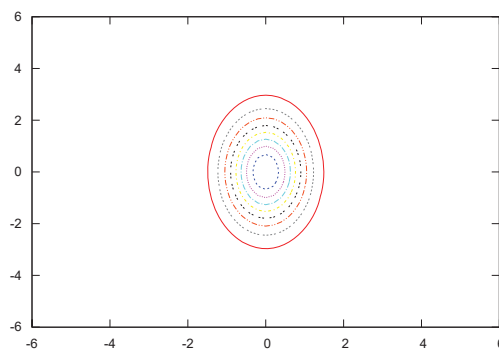


Figura 3.13: Oscilador armónico anisotrópico. Son las isocurvas de la función de onda vistas en el plano xz , para el caso $n_x = n_y = n_z = 0$.

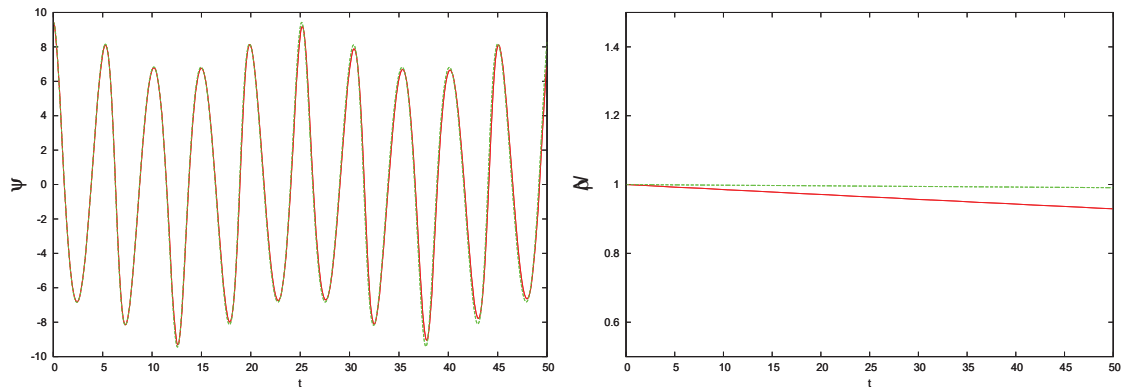


Figura 3.14: Oscilador armónico anisotrópico con $n_x = n_y = n_z = 0$. Se muestra a la izquierda Ψ_{Re} vs t y a la derecha N vs t . La curva roja es la correspondiente a un nivel de refinamiento, mientras que la curva verde se realizó con dos niveles de refinamiento.

Prueba 2

La última de las pruebas realizadas fue para el caso $n_x = 4$, $n_y = 2$ y $n_z = 0$ para dos niveles de refinamiento. En la Figura 3.15 se muestra Ψ_{Re} y ρ a lo largo de los ejes x , y y z . En las gráficas de la izquierda se muestra la evolución de Ψ_{Re} en el tiempo, durante el tiempo de la evolución el perfil que mantiene Ψ_{Re} es el mismo pero con un cambio en la amplitud. Por otro lado, ρ , se ve en las gráficas a la derecha, presenta una variación de la amplitud, dicha variación se encuentra dentro de un intervalo pequeño aunque en el caso ideal debería permanecer sin cambio.

Por otro lado, en la Figura 3.16 se muestran Ψ_{Re} y ρ proyectadas en el plano xz a distintos instantes de tiempo.

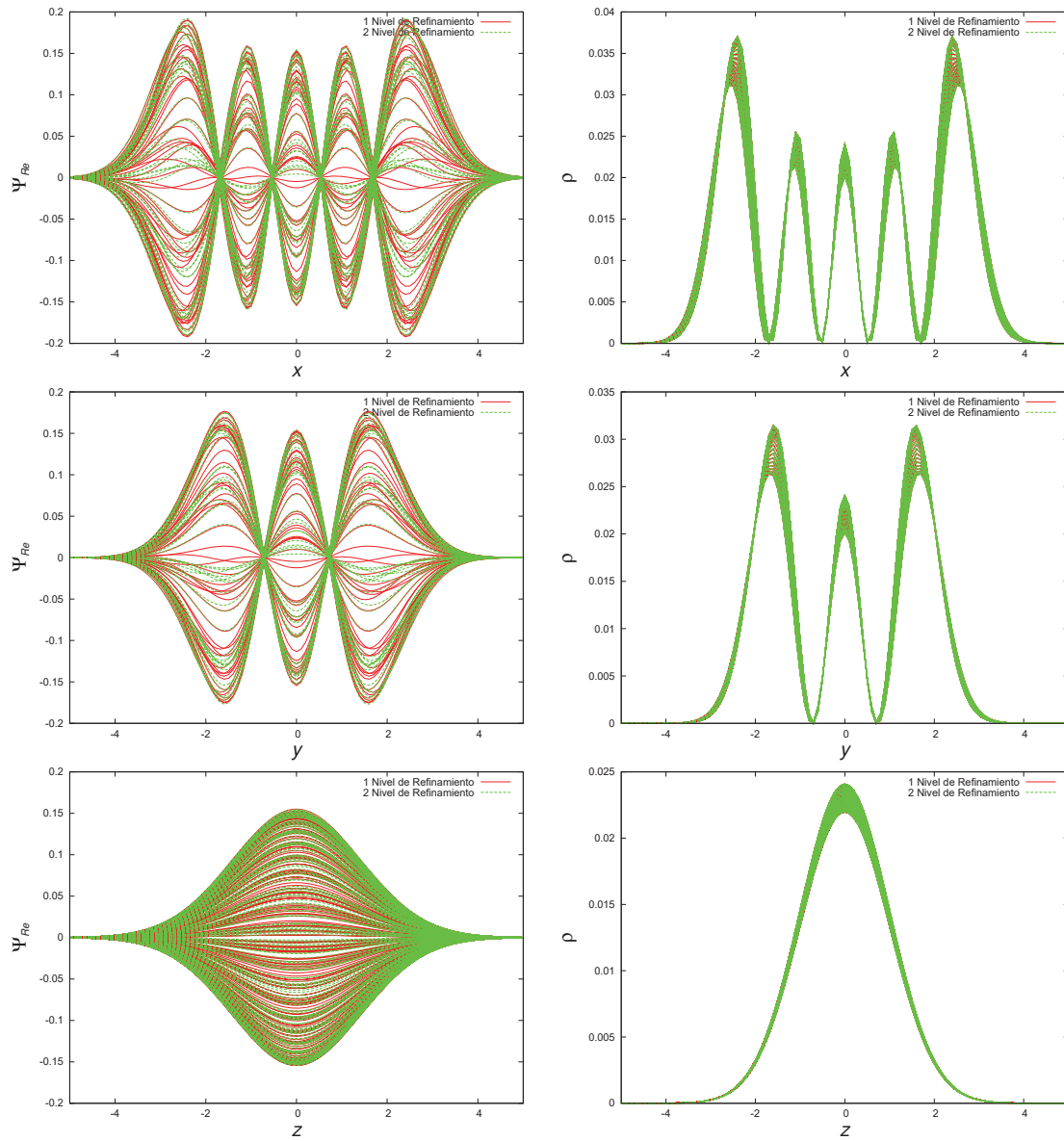


Figura 3.15: Muestra Ψ_{Re} y ρ a lo largo de cada uno de los ejes espaciales. Las gráficas obtenidas fueron calculadas con dos niveles de refinamiento y con los nodos $n_x = 4$, $n_y = 2$ y $n_z = 0$.

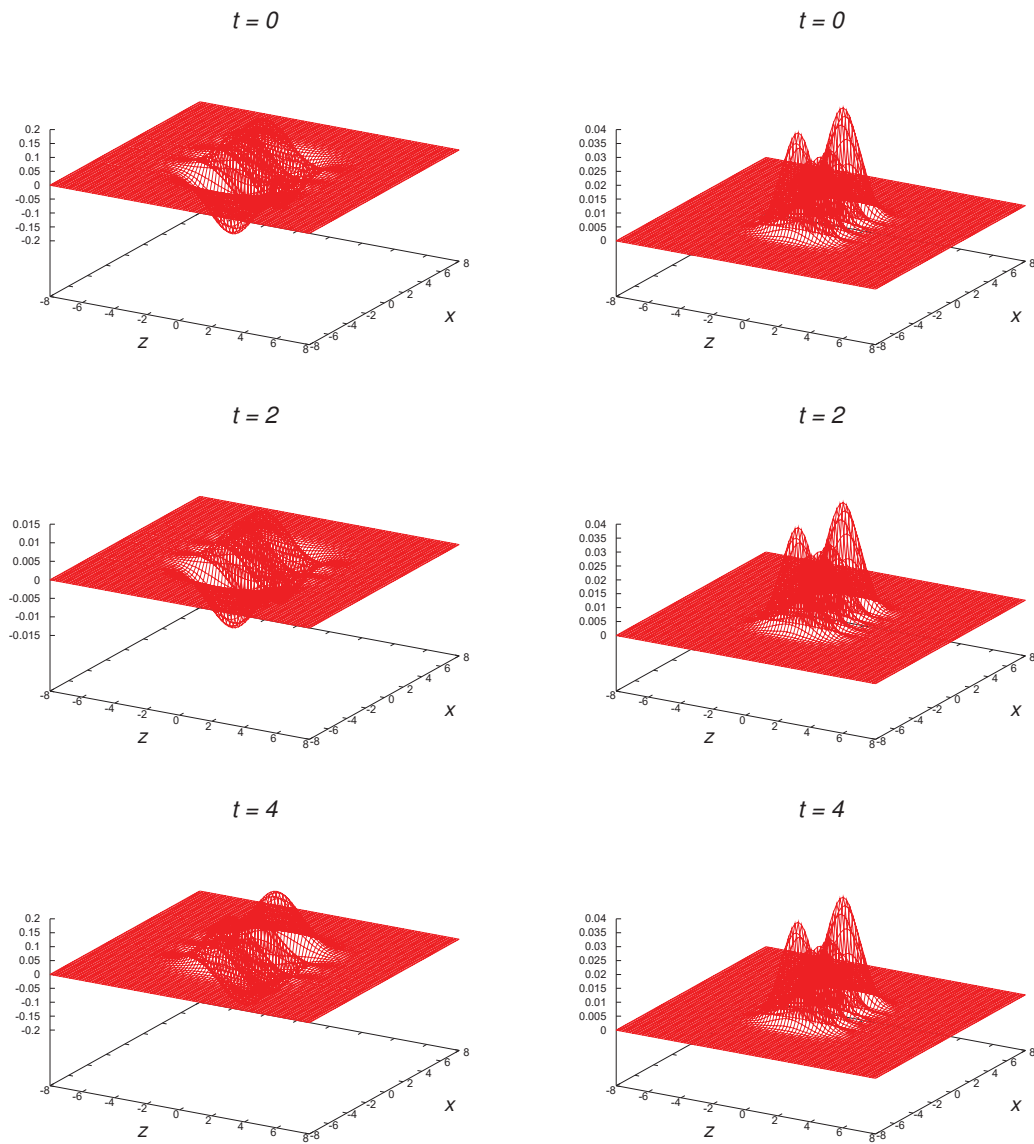


Figura 3.16: Muestra a Ψ_{Re} y ρ proyectadas en el plano xz a diferentes tiempos, $t = 0, 2, 4$ para $n_x = 4$, $n_y = 2$ y $n_z = 0$. Las gráficas obtenidas fueron calculadas con dos niveles de refinamiento.

Capítulo 4

Simulación del condensado de Rb-87

Se está interesado en reproducir la formación del condensado de Bose-Einstein para un gas compuesto de átomos de Rb-87 numéricamente. Como se ha mencionado antes, el modelo utilizado para estudiar la dinámica del gas es la ecuación de GP:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial \tilde{t}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \tilde{\Psi} + \frac{m\omega^2}{2} (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \epsilon \tilde{z}^2) \tilde{\Psi} + NU_0 |\tilde{\Psi}|^2 \tilde{\Psi}. \quad (4.1)$$

Para lograrlo es necesario que los parámetros numéricos simulen los parámetros físicos. De los experimentos en [3] se tienen los siguientes parámetros: se considera una caja cúbica, recipiente de vidrio de $50 \mu m$ de lado, donde los átomos fueron incorporados y donde se llevó a cabo el experimento y átomos de Rb-87 en un gas diluido, la nube se coloca en el centro del dominio numérico, que corresponde a la posición del centro de la trampa en el experimento [4]. Una vez los átomos han sido puestos dentro de la caja se sigue con el confinamiento de los átomos; para lo cual se emplea la configuración de láseres como en el capítulo 2. Esto resulta en un potencial de tipo oscilador armónico con constantes de resorte iguales en las tres direcciones espaciales.

Enseguida el cuadrupolo magnético colocado fuera de la caja se hace rotar con un periodo de oscilación de $50 Hz$, provocando que la trampa se alargue en la dirección z , añadiendo el efecto de la anisotropía al potencial armónico.

Después de $20 ms$ la mayoría de los átomos se encuentran localizados en una región específica de la caja, a partir de este momento las interacciones entre los átomos se hace más fuerte provocando que estos comiencen a sufrir colisiones elásticas generando un segundo potencial llamado “potencial de auto-interacción” [4].

Para llevar a cabo el proceso de evaporación de los átomos más calientes, en donde aquellos átomos que se encuentran en un nivel más alto de energía serán liberados de la trampa armónica, el potencial armónico es reducido a la mitad adiabáticamente; al ser reducido el potencial sólo permanecerán los átomos que se encuentren en los niveles más bajos de energía. Para ilustrar lo descrito anteriormente se muestra la Figura 4.1.

Finalmente, se deja expandir la nube de átomos por $60 ms$, después de este tiempo

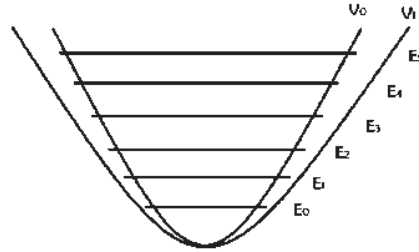


Figura 4.1: Se muestra un esquema de lo que ocurre cuando la trampa es reducida a la mitad. Los átomos que se encuentran en los niveles más altos escapan del efecto de la trampa, permaneciendo así aquellos que se encuentran en los niveles más bajos de energía.

es cuando los átomos repentinamente pasan al estado de mínima energía, concentrándose nuevamente en el centro de la trampa, y es en ese momento cuando el condensado se ha formado. En la Figura 2.6 del capítulo 2 se muestran las imágenes de la formación del BEC obtenidas en el experimento realizado en [3].

Para realizar la simulación numérica es necesario que la ecuación de GP tenga unidades de código, ésto se logra redefiniendo las variables contenidas en dicha ecuación de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 t &= \omega \tilde{t}, \\
 x &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tilde{x}, \\
 y &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tilde{y}, \\
 z &= \sqrt{\frac{m\omega\epsilon}{\hbar}} \tilde{z}, \\
 a &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tilde{a}, \\
 \Psi &= \sqrt[4]{\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3} \tilde{\Psi},
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

donde t , x , y , z , a y Ψ son variables que tienen unidades de código y \tilde{t} , \tilde{x} , \tilde{y} , \tilde{z} , \tilde{a} y $\tilde{\Psi}$ son variables físicas. Al sustituir las ecuaciones de (4.2) en la ecuación de GP se obtiene la

ecuación de GP dimensional:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \epsilon\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + \frac{z^2}{\epsilon})\Psi + 4\pi Na|\Psi|^2\Psi, \quad (4.3)$$

la cual está definida en un dominio discreto D . Esta ecuación es válida siempre que las fluctuaciones entre las partículas no afecten la dinámica macroscópica del sistema, por lo que para este caso las fluctuaciones son omitidas al establecer la distribución de densidad del condensado [4]. Además, se considera que el experimento es válido en el régimen de campo medio, donde no se considera la dispersión ni la expansión de la trampa.

Para simular la parte donde los átomos son agregados a la caja se agrega la función $G(t)$ dependiente del tiempo en el término de auto-interacción de la ecuación de GP. La función $G(t)$ tiene la siguiente forma:

$$G(t) = \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{\pi t}{t_r}\right)\right], \quad (4.4)$$

el tiempo de rampa t_r es el tiempo que tomará agregar todos los átomos a la caja y a partir de este tiempo la función $G(t) = 1$ indicando que la cantidad de átomos ya no aumentará.

Lo que sigue es disminuir el potencial generado por la trampa un 50 %, lo que corresponde al proceso de evaporación de los átomos más calientes. Esto se logra añadiendo al modelo numérico una función dependiente del tiempo, $H(t)$, multiplicando al término que contiene el potencial en la ecuación de GP; dicha función tiene la forma:

$$H(t) = (\tanh(-(t - (t_r + d))/j) + k)/2, \quad (4.5)$$

donde d , j y k son parámetros seleccionados para ajustar la función tangente hiperbólica y t_r es el tiempo de rampa. De la expresión para $H(t)$ el parámetro k es de gran importancia en la simulación del BEC, puesto que, esta función es la que se encargará de simular la parte de la evaporación de los átomos, reduciendo la trampa hasta la mitad de su capacidad, esto es, multiplicar la frecuencia de oscilación de la trampa por 0.5.

Al introducir $G(t)$ y $H(t)$ a la ecuación (4.3), ésta toma la siguiente forma:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \epsilon\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}H(t)(x^2 + y^2 + \frac{z^2}{\epsilon})\Psi + 4\pi NaG(t)|\Psi|^2\Psi, \quad (4.6)$$

ésta es la ecuación que se considerará en la simulación.

Para iniciar la simulación se requiere establecer el dominio numérico donde (4.3) esta definida, se utilizan las ecuaciones de (4.2), se considera la masa del Rb-87 como 1.4×10^{25} y la frecuencia de oscilación de la trampa como 50 Hz , de donde se obtiene que el dominio numérico es $[-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8]$.

Una vez que el dominio ha sido definido se inicia la evolución de la función de onda

por medio de la ecuación de GP adimensional. Al tiempo inicial $t = 0$ el potencial se encuentra encendido a un 100 % de su capacidad, es decir, no hay evaporación de los átomos más calientes. Por otro lado, el término que representa la interacción entre los átomos está apagado.

A partir de $t_r = 1$ los átomos ya están localizados en un lugar específico y lo que sigue es simular la parte de la evaporación de los átomos más calientes y la expansión de la nube de átomos se disminuyen las constantes de resorte del oscilador armónico por un factor de $\frac{1}{2}$ lo que provoca que la nube resultante aumente su tamaño debido al cambio que presenta la fuerza que mantiene a los átomos atrapados, como se puede ver en la Figura 4.1, así como la autointeracción repulsiva de los átomos; en este punto sólo quedan aquellos átomos que tienen energías más bajas. Una vez realizado este proceso se deja expandir la nube de átomos que se ha formado, se espera observar que la nube se hace más densa en el centro, rodeada por una parte menos densa, y será a partir de este momento que el condensado se ha formado.

Otra cantidad importante a considerar es la distribución espacial de la energía cinética del sistema, E_c , la cual está dada por el valor de expectación de E_c :

$$-\frac{1}{2}\Psi^*\nabla^2\Psi(x, y, z, t).$$

Esta expresión proporciona la información necesaria para conocer el momento en que los átomos alcanzan velocidades cercanas a cero, indicando que estos han sido atrapados y llevados a temperaturas cercanas al cero absoluto.

Lo que se espera obtener es que al aumentar la densidad de la nube la energía cinética disminuya, esto indicará la formación del condensado.

Para realizar las distintas etapas descritas anteriormente se requiere tener una versión discreta de la ecuación GP, por lo que se considera que la función de onda Ψ tiene la forma $\Psi = \Psi_{Re} + i\Psi_{Im}$ y el potencial tiene la forma $V = V_{Re} + iV_{Im}$, además, se define $\lambda = 4\pi Na$, sustituyendo lo anterior en la ecuación (4.3) se obtienen dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi_{Im}}{\partial t} = & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\Psi_{Re}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_{Re}}{\partial y^2} + \epsilon \frac{\partial^2\Psi_{Re}}{\partial z^2} \right) \\ & + (V_{Im}\Psi_{Im} - V_{Re}\Psi_{Re}) \\ & - \lambda(\Psi_{Re}^2 + \Psi_{Im}^2)\Psi_{Re}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Psi_{Re}}{\partial t} = & -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2\Psi_{Im}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_{Im}}{\partial y^2} + \epsilon \frac{\partial^2\Psi_{Im}}{\partial z^2} \right) \\ & + (V_{Im}\Psi_{Re} + V_{Re}\Psi_{Im}) \\ & + \lambda(\Psi_{Re}^2 + \Psi_{Im}^2)\Psi_{Im}, \end{aligned}$$

y las expresiones para la energía cinética toman la siguiente forma:

$$K = -\frac{1}{2} \left(\Psi_{Re} \nabla^2 \Psi_{Re} + \Psi_{Im} \nabla^2 \Psi_{Im} \right),$$

$$W = \frac{1}{2} \left(\Psi_{Im} \nabla^2 \Psi_{Re} - \Psi_{Re} \nabla^2 \Psi_{Im} \right).$$

La discretización de las ecuaciones anteriores se hace análogamente que para los casos descritos en el capítulo 3, obteniendo como resultado ecuaciones semi-discretas que se resolverán empleando el método de líneas.

4.1. Experimento numérico

La evolución del sistema se inicia considerando la función de onda en el estado base del potencial armónico, es decir, al tiempo inicial $t_i = 0$, el término de auto-interacción está apagado, $G(t) = 0$ y el potencial está al 100 % de su capacidad, por lo que la condición inicial $\Psi_i(\vec{r}, t)$ es:

$$\Psi_i(\vec{r}, t = 0) = \sqrt{\frac{1}{\pi^{3/2} \sqrt{\epsilon} 2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} \exp\left(-\left(x^2 + y^2 + \frac{1}{\epsilon} z^2\right)/2\right) H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) H_{n_z}(\sqrt{\epsilon} z). \quad (4.7)$$

La malla definida está uniformemente espaciada y tiene una resolución de $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$; además se emplean dos niveles de refinamiento. El primer nivel está definido como el dominio completo D y el segundo nivel de refinamiento esta definido en $[-6.4 : 6.4] \times [-6.4 : 6.4] \times [-6.4 : 6.4]$ con una resolución $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$; el factor $c = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = 0.1$. Finalmente como la nube se distribuye en el centro de la de trampa se usan $n_x = n_y = n_z = 0$ se eligen igual a cero. Los parámetros utilizados en el modelo se muestran en la tabla 4.1, donde el número de átomos es estimado a partir de la densidad óptica y el tamaño de a para el spin polarizado del Rb-87, el cual ha sido medido recientemente con un buen grado de precisión [4].

Parámetros	Unidades Físicas	Unidades de Código
x	$60 \mu m$	12.8
y	$60 \mu m$	12.8
z	$60 \mu m$	12.8
a	$5.2 nm$	0.0013

Cuadro 4.1: Parámetros utilizados en el modelo.

4.1.1. Caso 1: Condensado con un potencial armónico isotrópico

En este experimento la ecuación de GP se evoluciona en el dominio $D = [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8]$ con 128 puntos en cada dirección espacial. Para este experimento se utiliza como condición inicial la solución exacta para la partícula en un potencial de oscilador armónico isotrópico, con $\epsilon = 1$ y $n_x = n_y = n_z = 0$, al tiempo $t = 0$. Se emplea una esponja como condición de frontera, para que la densidad que este cerca de las fronteras de la caja sea absorbida. También se usan dos niveles de refinamiento en el centro del dominio pues se busca tener mejores resultados ahí que es donde ocurre la física de nuestro interés.

Se muestran los resultados obtenidos para los tres experimentos realizados; el primero fue mantener el potencial constante al 100 % de su capacidad, sin liberar los átomos que poseen mayor energía, durante todo el tiempo de evolución; el segundo consistió en disminuir el potencial hasta el 90 % de su capacidad y por último se disminuyó el potencial hasta la mitad de su capacidad.

Simulación con un potencial de trampa que no libera los átomos de mayor energía

En la Figura 4.2 se muestran las gráficas de $\rho(x = 0, y = 0, z = 0, t)$ vs t . En ella se aprecian tres curvas distintas, la primera corresponde a $N = 1000$, la segunda corresponde a $N = 2000$ y la tercera es para $N = 3000$. En cada una se han identificado dos instantes de tiempo importantes: el primero cuando la curva presenta su mínimo valor antes de la formación del pico y se identifica como el momento en que los átomos se encuentran dentro de la trampa. El segundo es el valor máximo de la densidad, es decir, el punto más alto del pico. Este pico permite identificar la formación del condensado.

Una vez que se han identificado estos dos instantes de tiempo, se analiza lo que ocurre con la densidad, ρ , y el integrando de la energía cinética, K . En las Figuras 4.3, 4.4 y 4.5 se muestran estas cantidades. En la primera fila a la izquierda se muestra ρ en el eje x , donde se puede ver que la densidad correspondiente al instante de la formación del condensado tienen una mayor amplitud. En la gráfica de la derecha se muestra ρ y K en el eje x , en el tiempo en que se formó el condensado. En la segunda fila se muestra a ρ proyectada en el plano xy y en la tercera se muestra K proyectado en el mismo plano, antes de la formación del condensado y en el instante de tiempo donde la densidad es máxima.

De acuerdo con las Figuras 4.3, 4.4 y 4.5 se ve que la formación del condensado depende del número de átomos que se agregan a la trampa, ya que para 1000 átomos la energía cinética es alta cuando la densidad también lo es, contrario a lo que se esperaba que ocurriera. Al aumentar la cantidad de átomos la energía cinética se va haciendo cada vez menor en el centro de la trampa cuando ρ es máxima, como se puede ver en las Figuras 4.4 y 4.5. Esto indica que el proceso de formación del condensado depende del número de átomos N , para N pequeño el condensado no se forma, mientras que se forma conforme N aumenta, esto se ve del experimento realizado en [3] donde se reportó que el BEC estaba formado

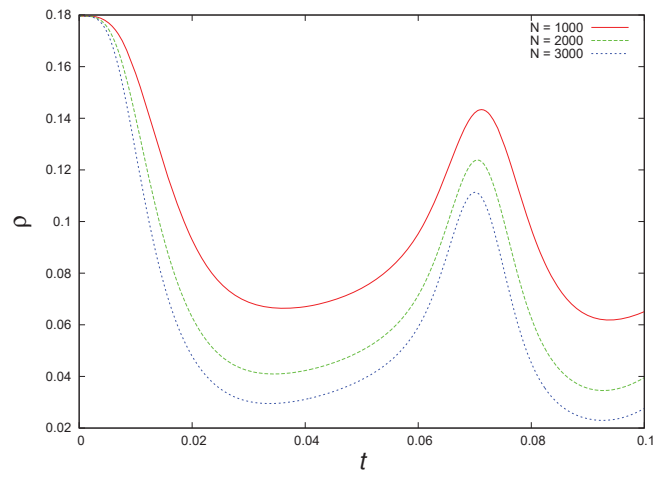


Figura 4.2: Se muestra el comportamiento de $\rho(x = 0, y = 0, z = 0, t)$ vs t , para $N = 1000$, $N = 2000$ y $N = 3000$. Esto nos permite identificar el momento en que se forma el BEC y el valor máximo de la densidad para cada valor de N .

por un número grande de átomos.

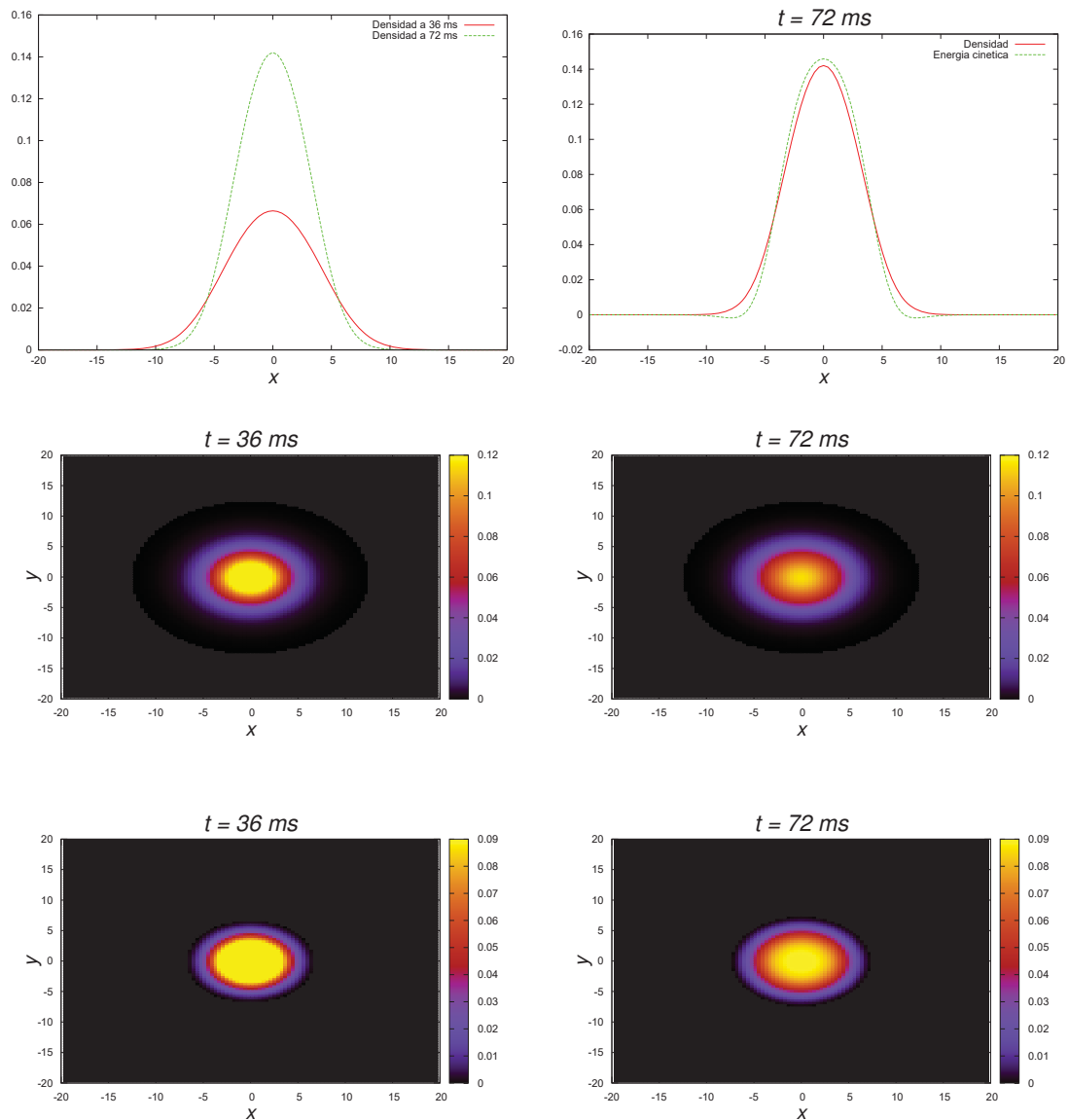


Figura 4.3: En estas gráficas se muestra la densidad y el integrando de la energía cinética. En la primera fila, a la izquierda se muestra ρ al tiempo $\tilde{t} = 36 \text{ ms}$ y al tiempo $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$ observando que ρ efectivamente aumenta, y en la gráfica de la derecha se muestra ρ y K a lo largo del eje x al tiempo $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$. En la segunda fila se muestra a ρ proyectada en el plano xy y en la tercera fila se muestra K en el mismo plano en los mismos instantes de tiempo. Estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y potencial al 100%. EL tiempo $\tilde{t} = 36 \text{ ms}$ corresponde al momento cuando se termina de inyectar todos los átomos, mientras que el tiempo $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$ es el momento cuando el condensado debería aparecer.

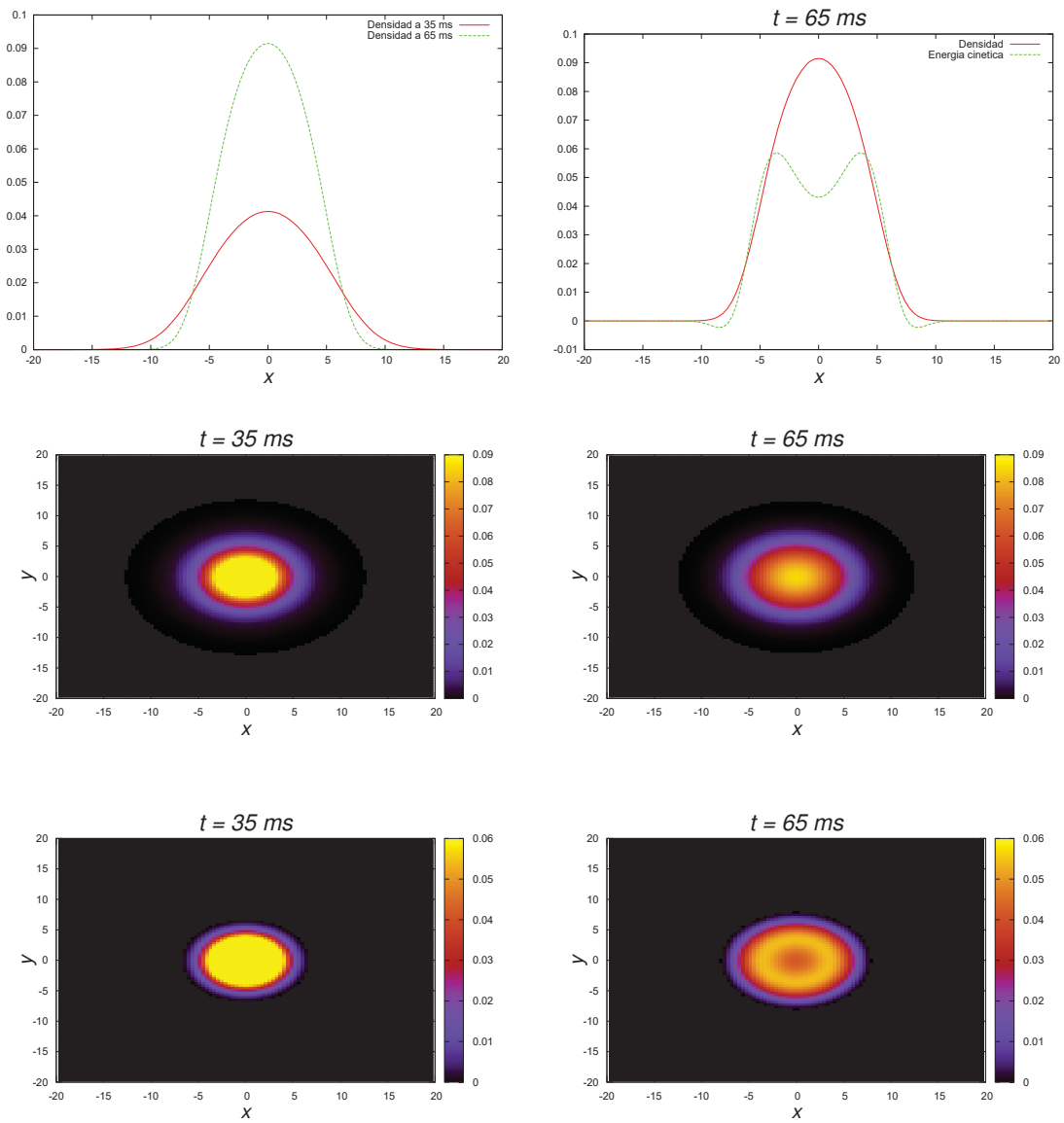


Figura 4.4: En estas figuras se muestra en la primera fila la densidad y el integrando de la energía cinética a lo largo del eje x , en la segunda fila se muestra ρ en el plano xy y la tercera fila corresponde a K , al tiempo donde todos los átomos han sido incorporados $\tilde{t} = 33 \text{ ms}$ y al tiempo donde se ha formado el condensado $\tilde{t} = 70 \text{ ms}$ para el caso $N = 2000$ y potencial al 100%.

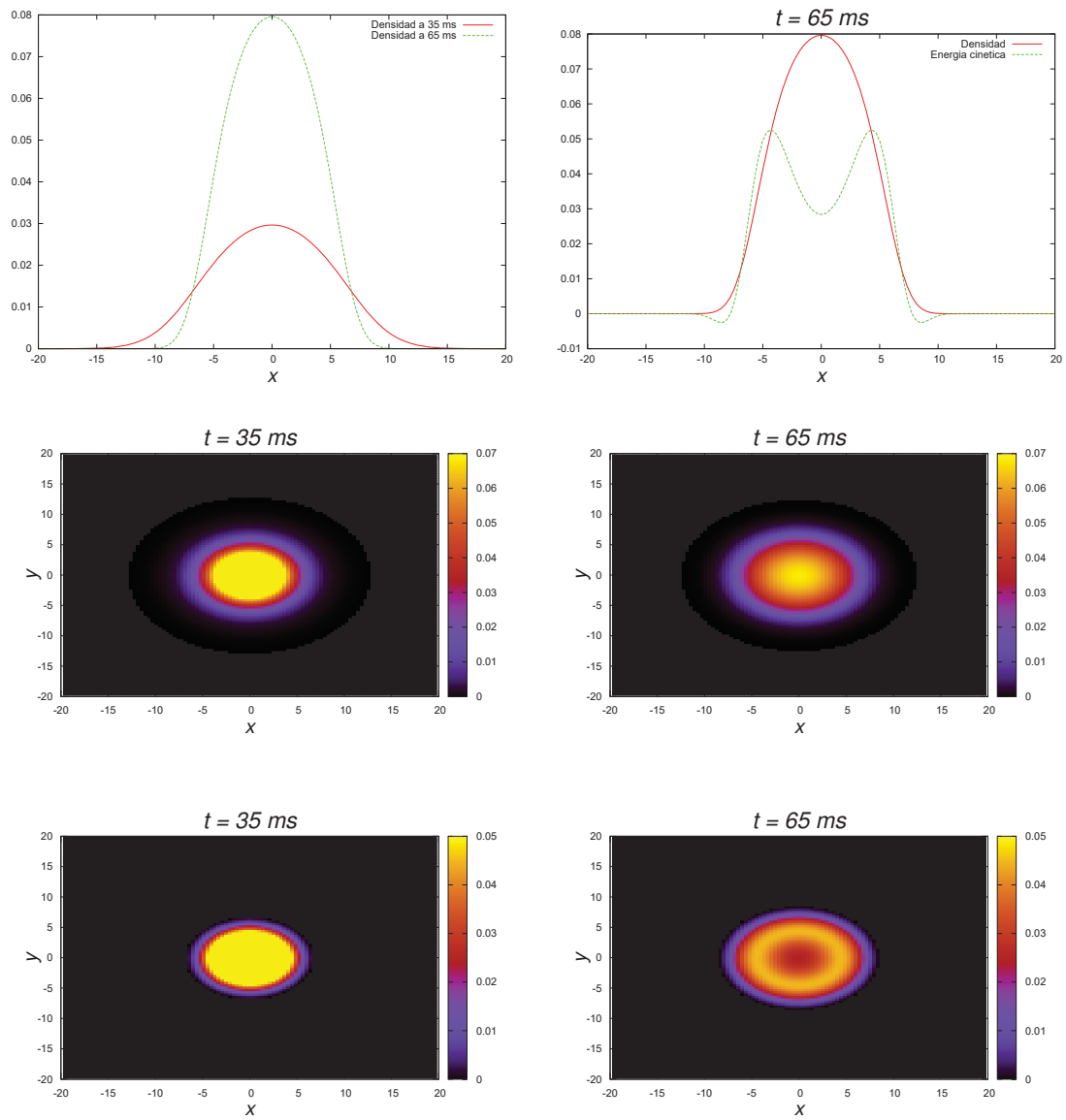


Figura 4.5: Se muestra en la primera fila a la izquierda la densidad en el instante de tiempo donde se han inyectado todos los átomos, $\tilde{t} = 32$ ms, y en el instante donde se ha formado el condensado, $\tilde{t} = 70$ ms, y en la gráfica de la derecha se muestra a ρ y a K al tiempo $\tilde{t} = 70$ ms. En la segunda fila se muestra ρ proyectada en el plano xy y en la tercera fila se ve K , ambas en los instantes de tiempo referidos anteriormente. Estas gráficas corresponden al caso $N = 3000$ y el potencial al 100 %.

Simulaciones con el potencial apropiado para simular la evaporación de átomos energéticos reduciendo el coeficiente a 90 %

En este experimento se inicio el proceso de evaporar aquellos átomos que poseen energías altas. Para lograrlo el potencial se disminuyó mediante el coeficiente $H(t)$, el cual se disminuyó hasta un 90 %.

Al igual que en el experimento anterior se graficó $\rho(0, 0, 0, t)$ para los tres valores del número de átomos N , como se puede ver en la Figura 4.6. La curva correspondiente a 1000 átomos tiene valores menores que las curvas correspondientes a las otras dos cantidades, esto porque al reducir el potencial, los átomos más calientes fueron liberados del efecto de la trampa, esto simula a la perfección que los átomos más energéticos escapan cuando el potencial disminuye y producen un condensado de menor energía cinética.

En las Figuras 4.7, 4.8 y 4.7, se muestran los resultados obtenidos para las tres cantidades de átomos. En las tres Figuras se cumple que cuando ρ es alta en el centro, la energía cinética es muy baja, siendo más evidente cuando se aumenta la cantidad de átomos. Encontrando que los resultados obtenidos se asemejan a lo que ocurre en el experimento, zona de densidad alta y energía cinética baja.

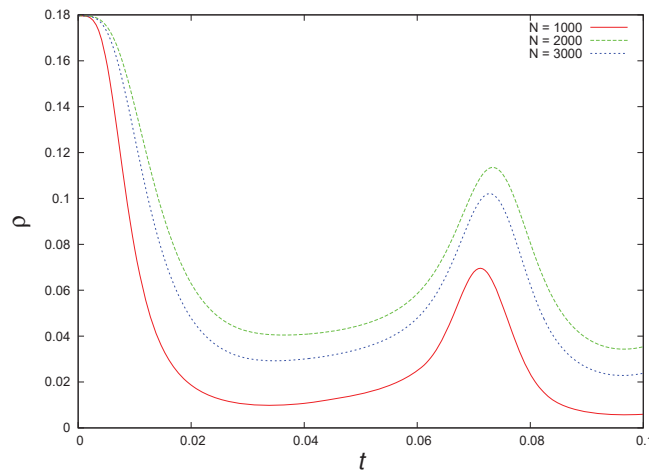


Figura 4.6: Se muestra $\rho(0, 0, 0, t)$ vs t cuando el potencial se ha reducido hasta el 90 % de su capacidad, evaporando los átomos más calientes. Las curvas corresponden a 1000, 2000 y 3000 átomos.

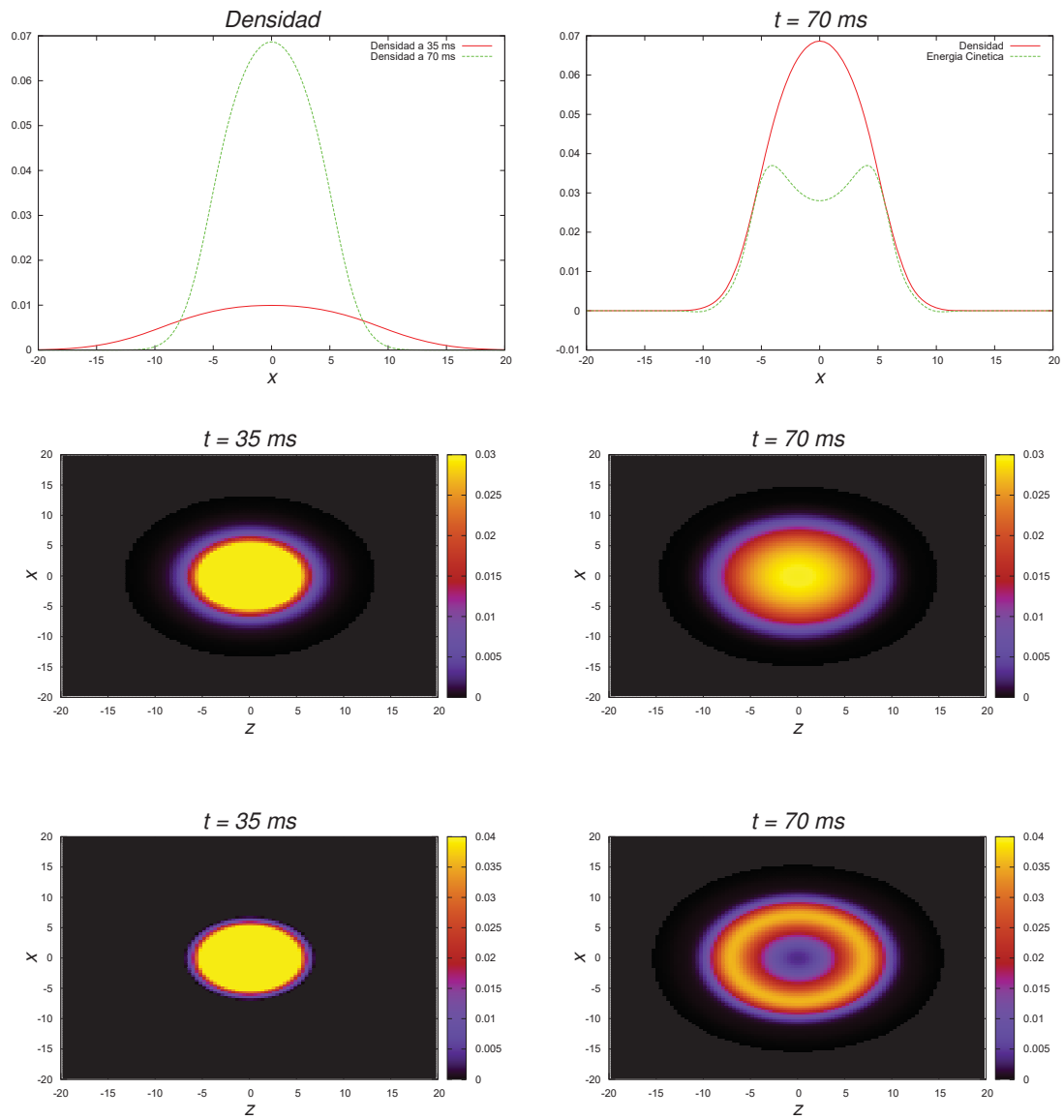


Figura 4.7: Se muestra ρ y K . En la primera fila a la izquierda se muestra ρ al tiempo donde se terminan de inyectar los átomos, $\tilde{t} = 35$ ms, y al tiempo donde debería de aparecer el condensado, $\tilde{t} = 70$ ms; mientras que en la gráfica de la derecha se muestra ρ y K a lo largo del eje x al tiempo $\tilde{t} = 70$ ms. En la segunda fila se muestra ρ proyectada en el plano xz y la tercera fila se muestra K proyectada en el mismo plano, en los tiempos $\tilde{t} = 35$ ms y $\tilde{t} = 70$ ms; estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y el potencial al 90 %.

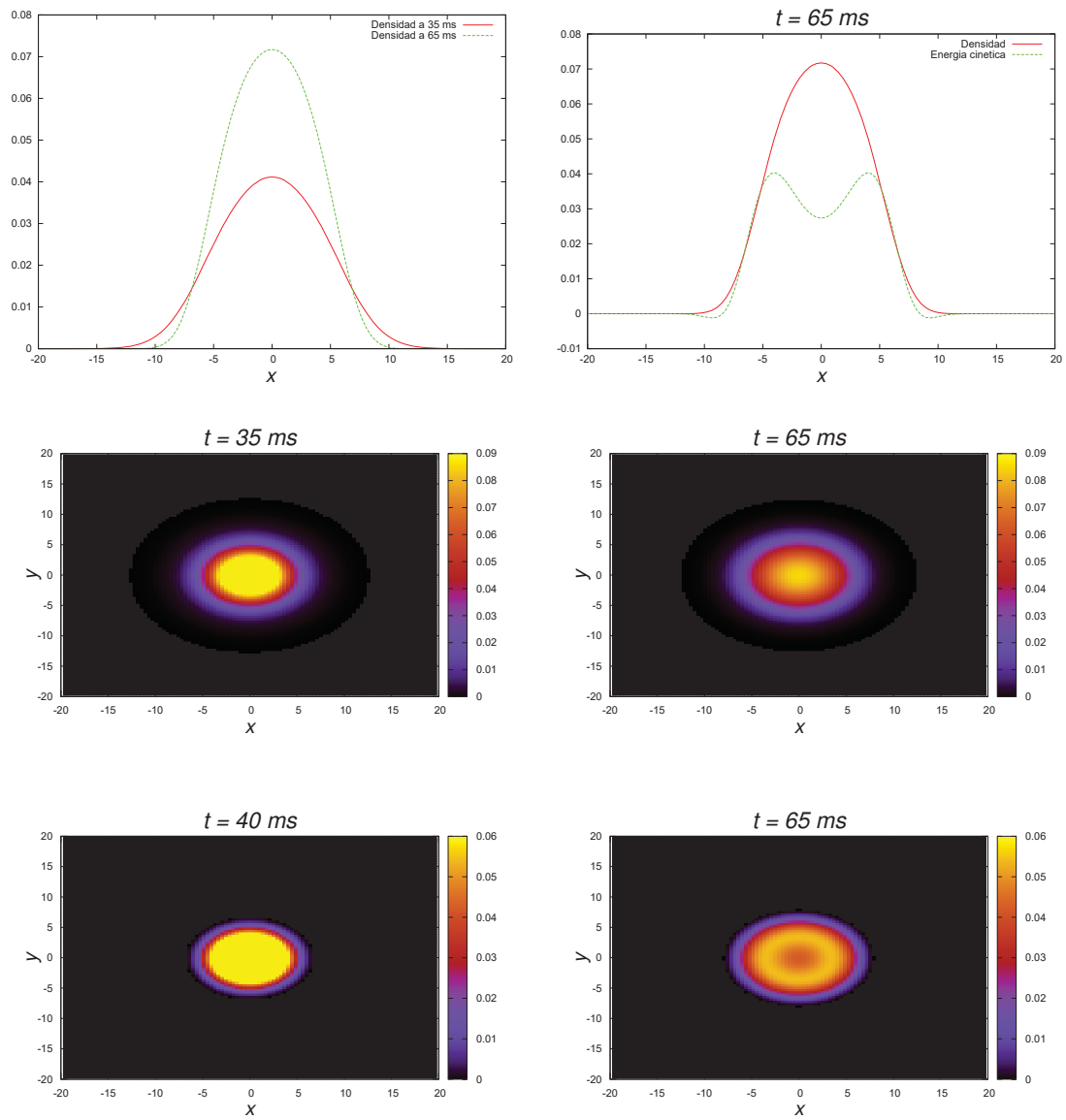


Figura 4.8: Muestra a ρ y a K , al tiempo donde todos los átomos han sido incorporados, $\tilde{t} = 35$ ms y al tiempo donde se ha formado el condensado, $\tilde{t} = 65$ ms; para el caso $N = 2000$ y el potencial al 90%. En ellas se puede observar que la energía cinética es baja y la densidad es alta en el centro de la trampa. La segunda fila corresponde a ρ proyectada en el plano xy y la tercera fila corresponde a K proyectada en el mismo plano.

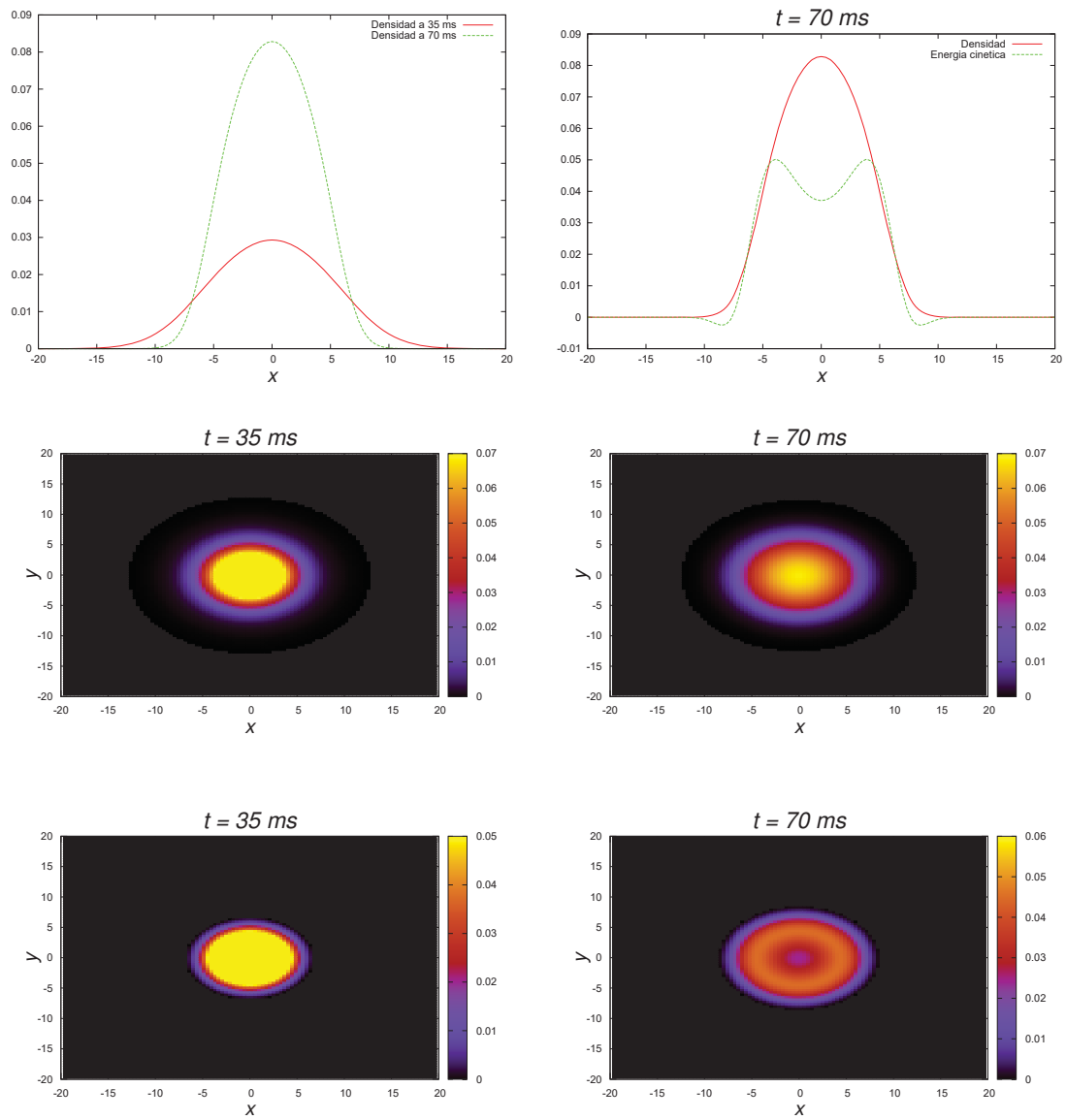


Figura 4.9: En estas gráficas se muestra a ρ y a K para 3000 átomos a dos tiempos, cuando se inyectan todos los átomos, $\tilde{t} = 35 \text{ ms}$, y cuando el condensado se ha formado, $\tilde{t} = 65 \text{ ms}$. El potencial se redujo hasta 90%. En la primera fila se muestra a la izquierda ρ y a la derecha ρ y K al tiempo cuando el potencial se ha formado. En la segunda fila se muestra a ρ y en la tercera fila se muestra K , ambas proyectadas en el plano xy .

Simulaciones con el potencial apropiado para simular la evaporación de átomos energéticos reduciendo el coeficiente a 50 %

Finalmente el último experimento realizado fue reducir el potencial hasta el 50 % de su capacidad como se hizo en [3], con lo cual sólo permanecen los átomos que se encuentran en los estados de energía más bajos. En la Figura 4.10 se muestran las tres curvas correspondientes a $N = 1000$, $N = 2000$ y $N = 3000$. Si se compara con las gráficas de las Figuras 4.2 y 4.10 se aprecia que el pico de $\rho(x = 0, y = 0, z = 0, t)$ tarda más tiempo en formarse, sin embargo, para los tres valores del número de átomos N el pico aparece en instantes de tiempo muy cercanos.

En las Figuras 4.11, 4.12 y 4.13 se muestran los resultados obtenidos para ρ y K antes de la formación del condensado y cuando el condensado se ha formado. Los resultados mostrados en las Figuras corresponden a 1000 átomos, 2000 átomos y 3000 átomos, respectivamente. En las tres Figuras aparece la zona de alta densidad y baja energía cinética, lo cual (como se ya se indicó anteriormente) es evidencia de la formación del condensado.

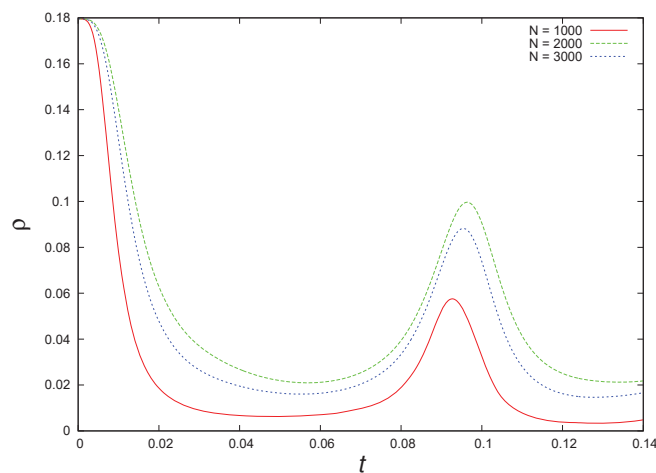


Figura 4.10: Se muestra la gráfica de $\rho(x = 0, y = 0, z = 0, t)$ vs t cuando el potencial se ha reducido un 50 % para 1000, 2000 y 3000 átomos.

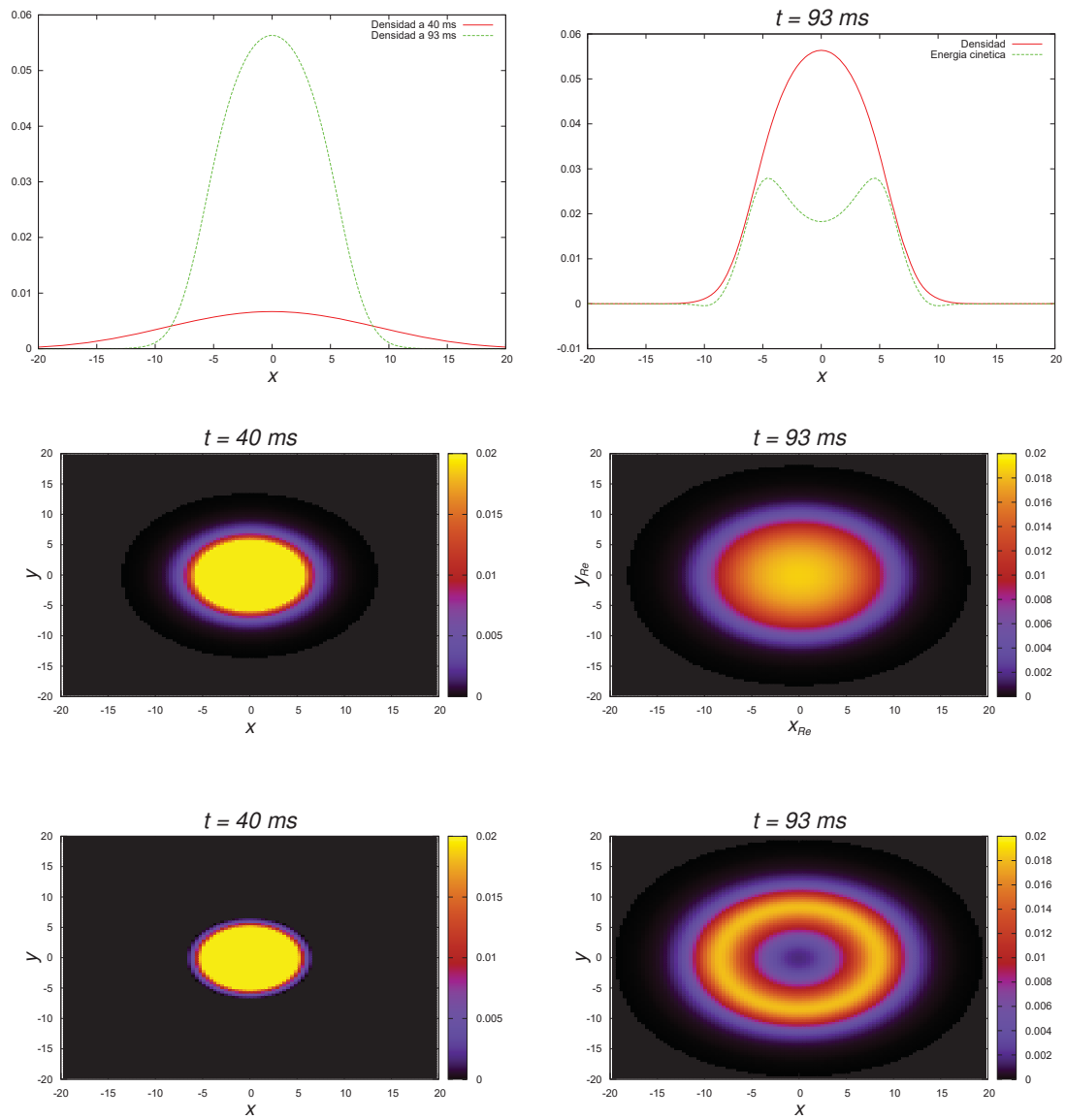


Figura 4.11: En la primera fila a la izquierda se muestra a ρ en el eje x al tiempo cuando todos los átomos se han incorporado, $\tilde{t} = 40 \text{ ms}$, y al tiempo cuando el condensado se formó, $\tilde{t} = 93 \text{ ms}$. Para verificar lo que ocurre con la energía cuando la densidad es alta, se muestra la gráfica de la primera del lado derecho. En la segunda se ve ρ y tercera fila se muestra K , ambas en el plano xy . Estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y el potencial al 50%.

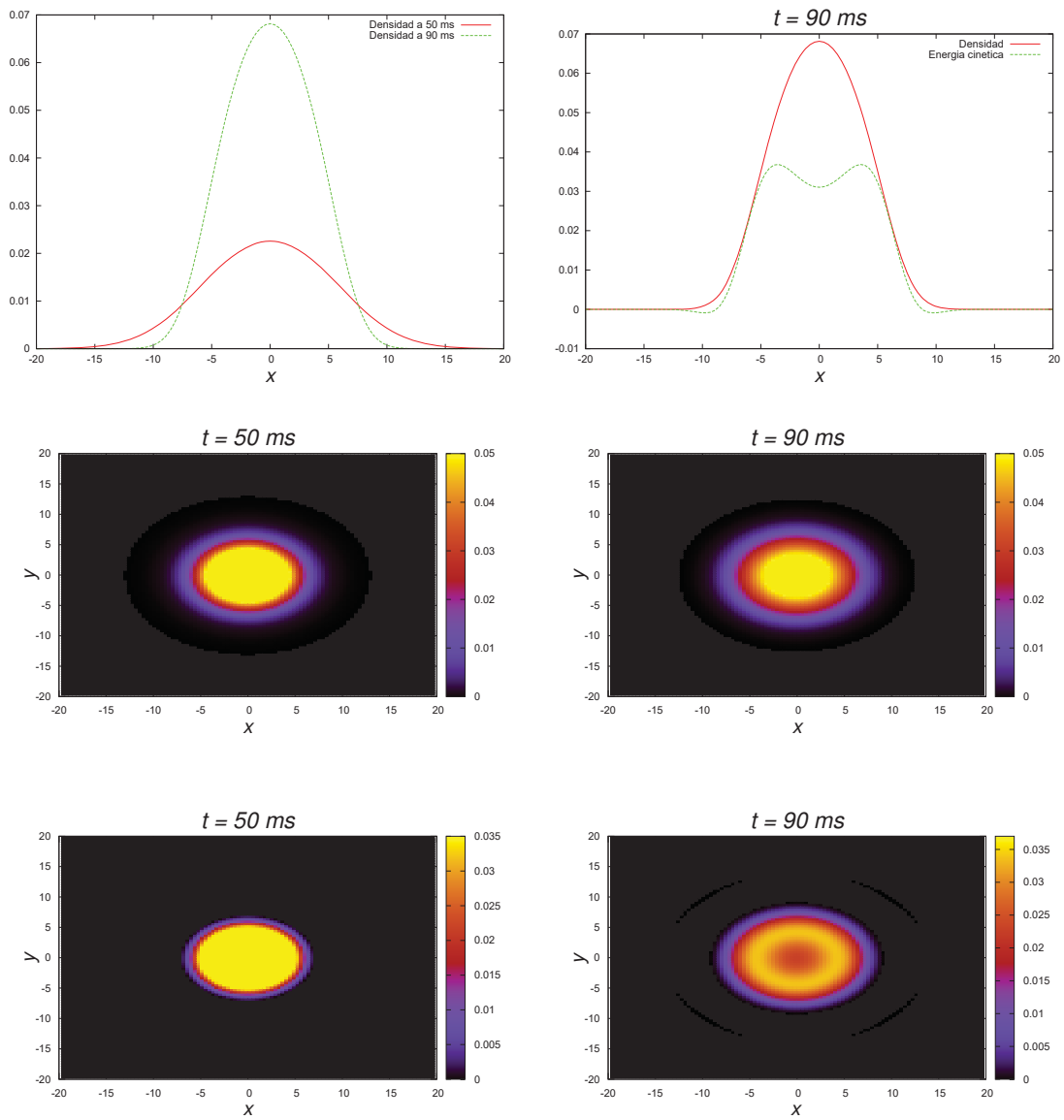


Figura 4.12: Se muestra en la primera fila ρ y K en el eje x ; en la segunda fila se muestra ρ en el plano xy , mientras que en la tercera fila se muestra K en ese mismo plano, al tiempo donde todos los átomos han sido incorporados, $\tilde{t} = 50$ ms, y al tiempo donde se ha formado el condensado, $\tilde{t} = 90$ ms para el caso $N = 2000$ y el potencial al 50%.

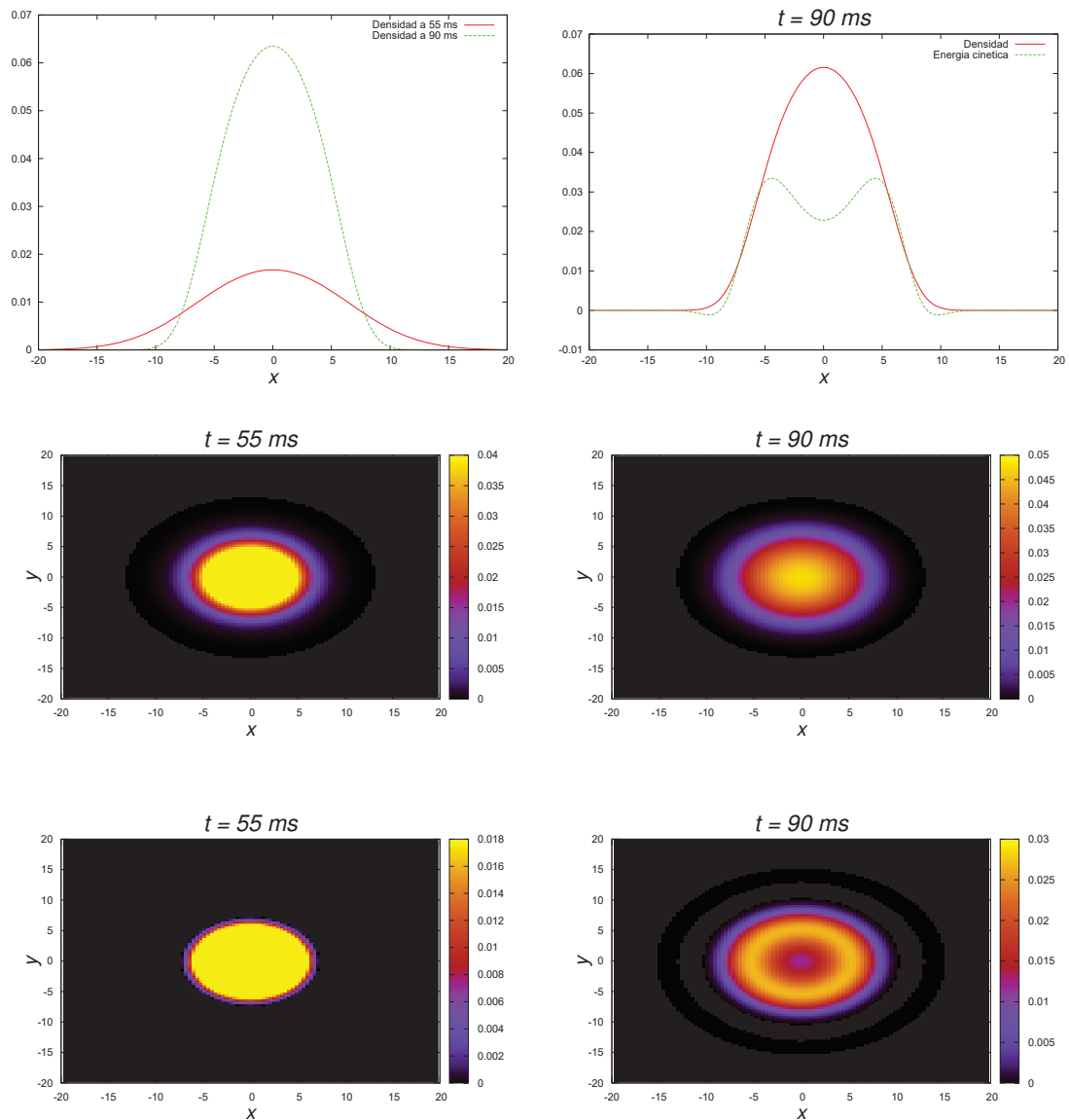


Figura 4.13: En la primera fila se presentan a ρ y a K en el eje x , mientras que en la segunda fila se presenta ρ en el plano xy y la tercera fila corresponde a K en el mismo plano, al tiempo cuando se inyectan los átomos, $\bar{t} = 55$ ms, y al tiempo donde se ha formado el condensado, $\bar{t} = 90$ ms. Estas gráficas corresponden al caso $N = 3000$ y el potencial al 50%.

4.1.2. Caso 2: Condensado con un potencial anisotrópico

En esta parte se muestran los resultados obtenidos de los experimentos realizados para la simulación del BEC, utilizando todos los elementos proporcionados por el experimen-

to realizado en [3]. Por lo tanto, del experimento numérico anterior a este sólo quedaba agregar el efecto de la anisotropía a la trampa armónica.

Resolviendo la ecuación (4.1) en el dominio $D = [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8] \times [-12.8, 12.8]$, el cual fue discretizado usando 128 puntos en cada una de las direcciones espaciales, $N_x = N_y = N_z = 128$, con una resolución de $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.2$. Para tener mejores resultados se agregó un segundo nivel de refinamiento en el centro del dominio D , que es donde ocurren los fenómenos físicos de interés, este refinamiento ocurre en $[-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4] \times [-6.4, 6.4]$ y tiene una resolución de $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.1$.

Al iniciar la evolución de (4.1) el término no lineal es igual a cero, por lo que la condición inicial es la misma que para la partícula en un potencial de oscilador armónico anisotrópico, donde $\epsilon = 2$ y $n_x = n_y = n_z = 0$, al tiempo $t = 0$. Además, se emplea una esponja como condición de frontera, puesto que, durante la evolución los átomos que sean liberados de la trampa y se aproximen a las fronteras de la caja deben ser absorbidos para evitar que puedan regresar y afecten los resultados. De esta manera se inicia la simulación del BEC empleando el método de líneas.

Se realizaron tres experimentos, el primero de ellos fue dejar el potencial totalmente encendido, al 100 % de su capacidad, el segundo fue reducir el potencial hasta un 90 % después de que los átomos han sido incorporados. Finalmente, el tercero que corresponde a reducir el potencial hasta la mitad de su capacidad, tal como se hizo en [3]. Para cada uno de ellos se consideran tres valores del número de átomos N , 1000, 2000 y 3000.

Simulación con un potencial de trampa que no libera los átomos de mayor energía

En este primer experimento la trampa se encuentra totalmente encendida durante todo el tiempo del experimento, por lo que los átomos con mayor energía no son liberados de la trampa, entonces todos los átomos son incorporados. Se consideran valores distintos del número de átomos, lo que significa que se estudia lo que ocurre al aumentar el número de átomos que son inyectados. Se espera que al aumentar el número de átomos, aumente la densidad y disminuya la energía cinética en el centro de la trampa.

En la Figura 4.14 se muestra $\rho(0, 0, 0, t)$ a lo largo del tiempo, cada una de las gráficas corresponden a los tres valores del número de átomos, 1000, 2000 y 3000. La formación del BEC se identifica con la aparición de un pico, ya que significa que los átomos se han concentrado en el centro de la trampa.

En las Figuras 4.15, 4.16 y 4.17 se presentan los resultados obtenidos para cada simulación. En la primera fila del lado izquierdo se muestra la densidad en el eje x antes de la formación del BEC, t_a , y en el momento en que se forma, t_{BEC} . La curva que corresponde al tiempo t_{BEC} es más angosta y con una mayor amplitud. En la gráfica de la derecha se muestra a ρ y a K en el eje x al tiempo t_{BEC} . En las gráficas de la segunda fila aparece ρ proyectada en el plano xz en los tiempos t_a y t_{BEC} , mientras que en la tercera fila se muestra K en el plano xz en los mismos instantes de tiempo.

Al igual que en el experimento anterior se puede ver que la formación del condensado

depende del número de átomos que se agregen. Esto se ve en la Figura 4.15 donde la energía cinética es aproximadamente del mismo orden de ρ , contrario a lo que se espera ver cuando hay evidencia de un BEC. Al aumentar el número de partículas la energía disminuye cuando la densidad aumenta.

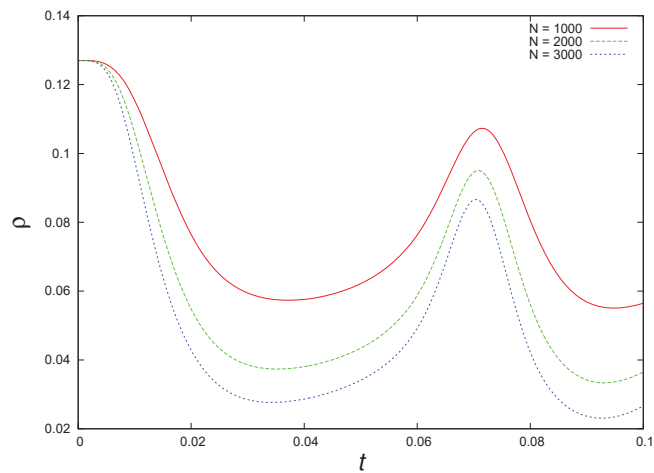


Figura 4.14: Se muestra el comportamiento del valor central de ρ en el tiempo, para $N = 1000$, $N = 2000$ y $N = 3000$. Esto nos permite identificar el momento en que se forma el BEC y el valor máximo de la densidad para cada valor de N .

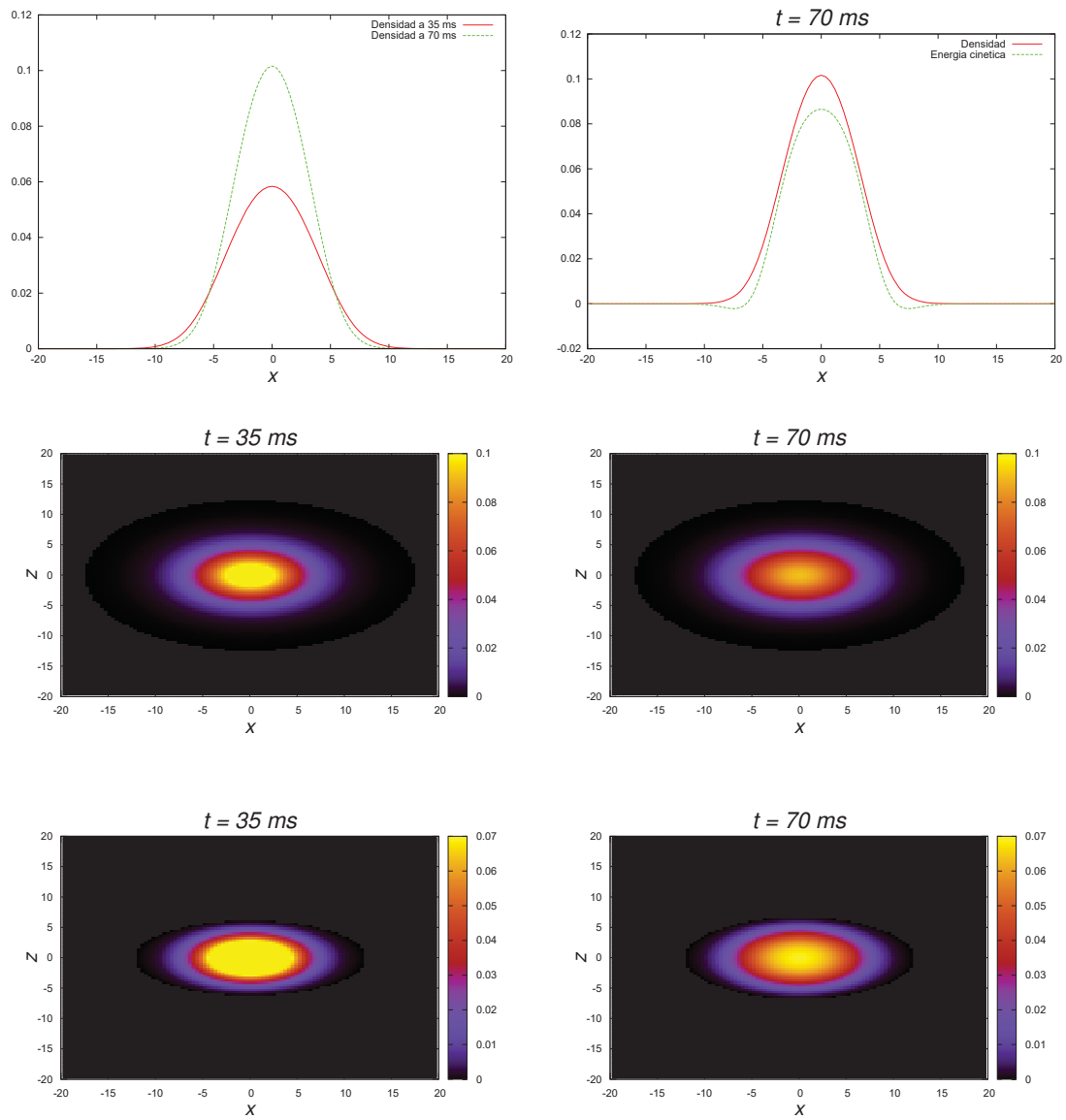


Figura 4.15: En estas gráficas se muestra la densidad y la energía cinética. En la primera fila, a la izquierda se muestra ρ al tiempo donde todos los átomos se han inyectado, $\tilde{t} = 35$ ms, y al tiempo donde debería aparecer el condensado, $\tilde{t} = 65$ ms, observando que ρ efectivamente aumenta y en la gráfica de la derecha se muestra ρ y K a lo largo del eje x al tiempo $\tilde{t} = 65$ ms. En la segunda fila se muestra ρ , mientras que en la tercera fila se muestra K ambas proyectadas en el plano xz en los mismos instantes de tiempo. Estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y potencial al 100 %.

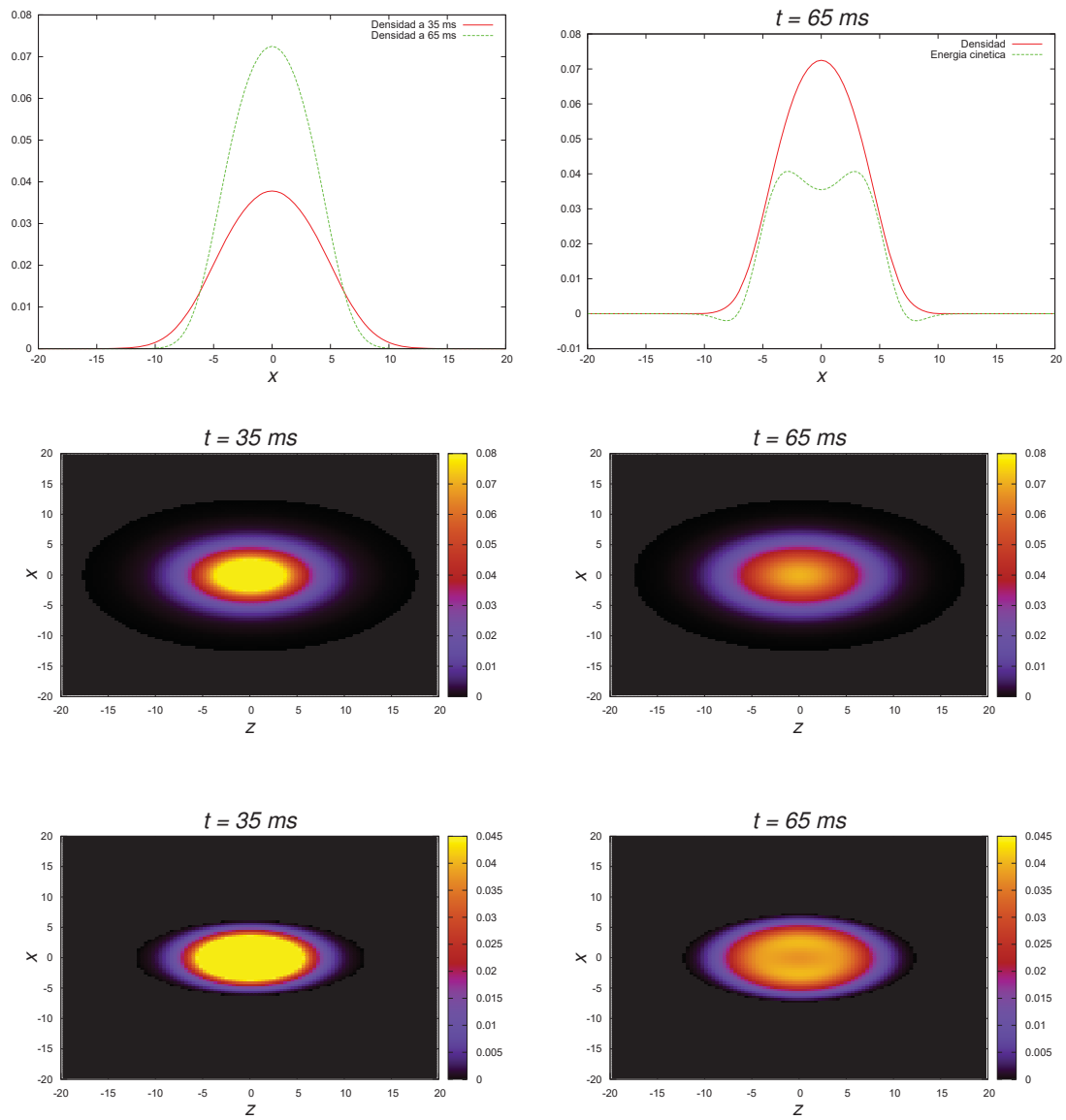


Figura 4.16: En la primera fila a la izquierda se muestra la densidad cuando se termina de inyectar los átomos, $\tilde{t} = 38 \text{ ms}$, y al tiempo donde se forma el condensado, $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$. Por otra parte en la gráfica de la derecha se muestra ρ y K en el eje x al tiempo $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$. En la segunda fila se muestra ρ proyectada en el plano xz y la tercera corresponde al integrando de la energía cinética, K , en el mismo plano, a los tiempos $\tilde{t} = 38 \text{ ms}$ y $\tilde{t} = 72 \text{ ms}$ para el caso $N = 2000$ y potencial al 100%.

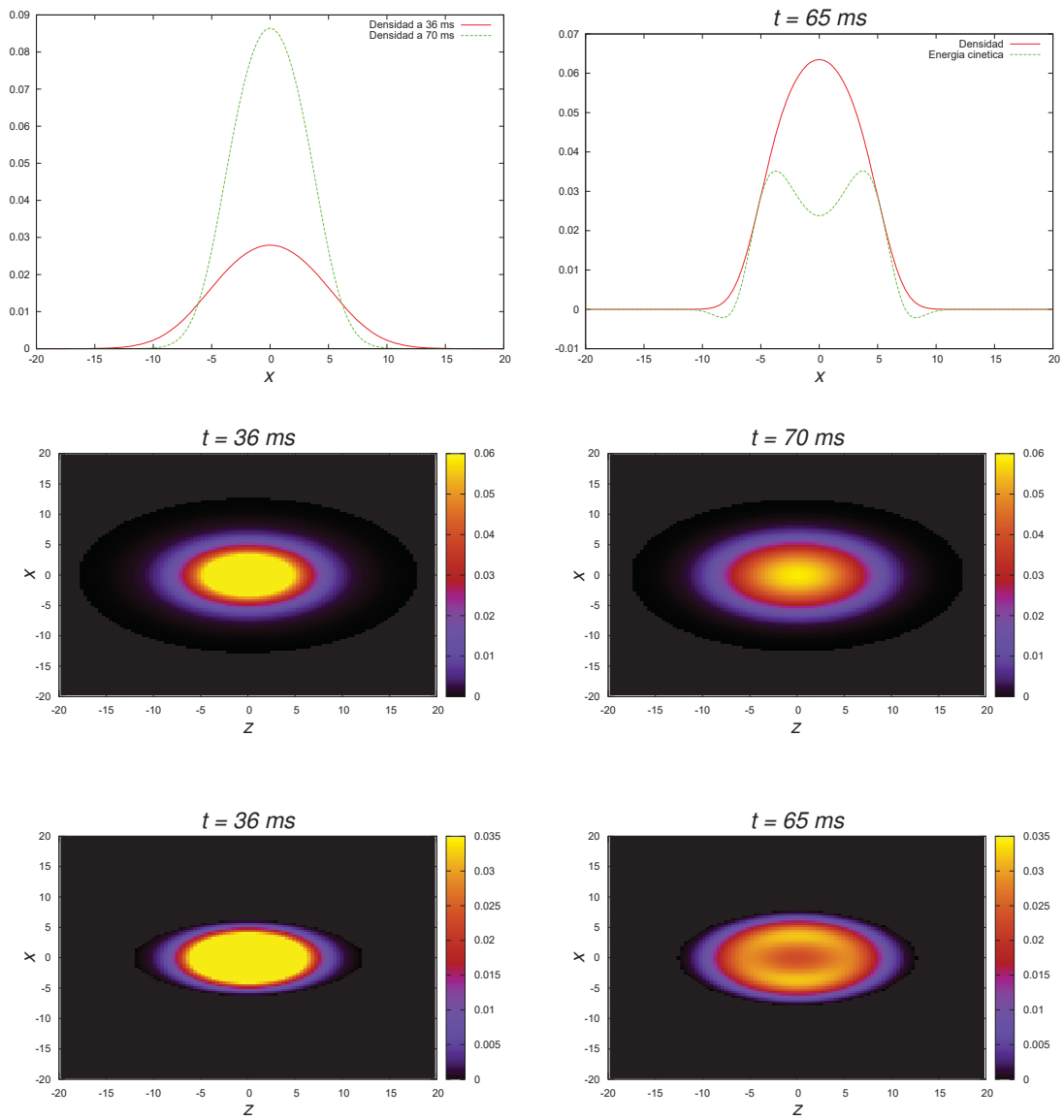


Figura 4.17: En las gráficas de la primera fila se muestra la densidad, ρ , y el integrando de la energía cinética, K , en el eje x , en la segunda fila se muestra ρ y en la tercera fila aparece K , ambas proyectadas en el plano xz , antes de la formación del BEC y al tiempo donde se forma. Todas las gráficas corresponde al caso $N = 3000$ y el potencial al 100 %.

Simulaciones con el potencial apropiado para simular la evaporación de átomos energéticos reduciendo el coeficiente a 90 %

El segundo experimento consistió en incorporar los átomos; una vez que los átomos han sido completamente incorporados la trampa comienza a reducirse lentamente, hasta llegar al 90 % de su capacidad, lo que corresponde al proceso de evaporación de los átomos más calientes.

En la Figura 4.18 se muestran las gráficas correspondientes $\rho(0, 0, 0, t)$ para los tres valores de N considerados. El pico aparece aproximadamente al mismo tiempo que para el experimento anterior, pero el punto máximo del pico de cada curva es menor que para el caso anterior, esto se debe a que se evaporaron los átomos más calientes, por lo que la densidad en el centro de la trampa fue menor.

Por otra parte, en las Figuras 4.19, 4.20 y 4.21, se muestran distintas gráficas para ρ y para K , donde se muestra que efectivamente se ha formado el condensado. En las Figuras se aprecia que la densidad es alta y la energía cinética es mínima en el centro de la trampa al tiempo donde ocurre el condensado. Disminuir el potencial un 10 % no es suficiente para obtener un BEC, porque aunque ocurre el proceso de evaporación, aún permanecen átomos con energías altas. Es por ello que se requiere que el potencial sea reducido hasta la mitad de su capacidad.

La formación del BEC depende no sólo del número de átomos sino también de la anisotropía de la trampa. Esto se ve al comparar las Figuras 4.19 y 4.7, en ambas se agregó el mismo número de átomos y se disminuyó el potencial hasta el 90 % de su capacidad; sin embargo, en la Figura 4.7, que corresponde a la trampa sin anisotropía, se observa la zona de densidad alta y energía cinética baja en el centro de la trampa, lo que no ocurre en la Figura 4.19.

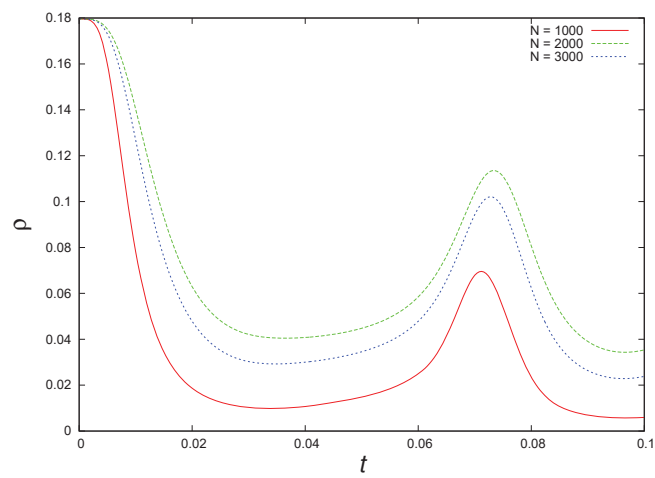


Figura 4.18: Esta gráfica muestra a $\rho(0, 0, 0, t)$ vs t . Las curvas corresponden a 1000, 2000 y 3000 átomos; las tres curvas presentan la formación del pico, lo cual permite identificar el momento en que la densidad es máxima y su valor para cada valor de N .

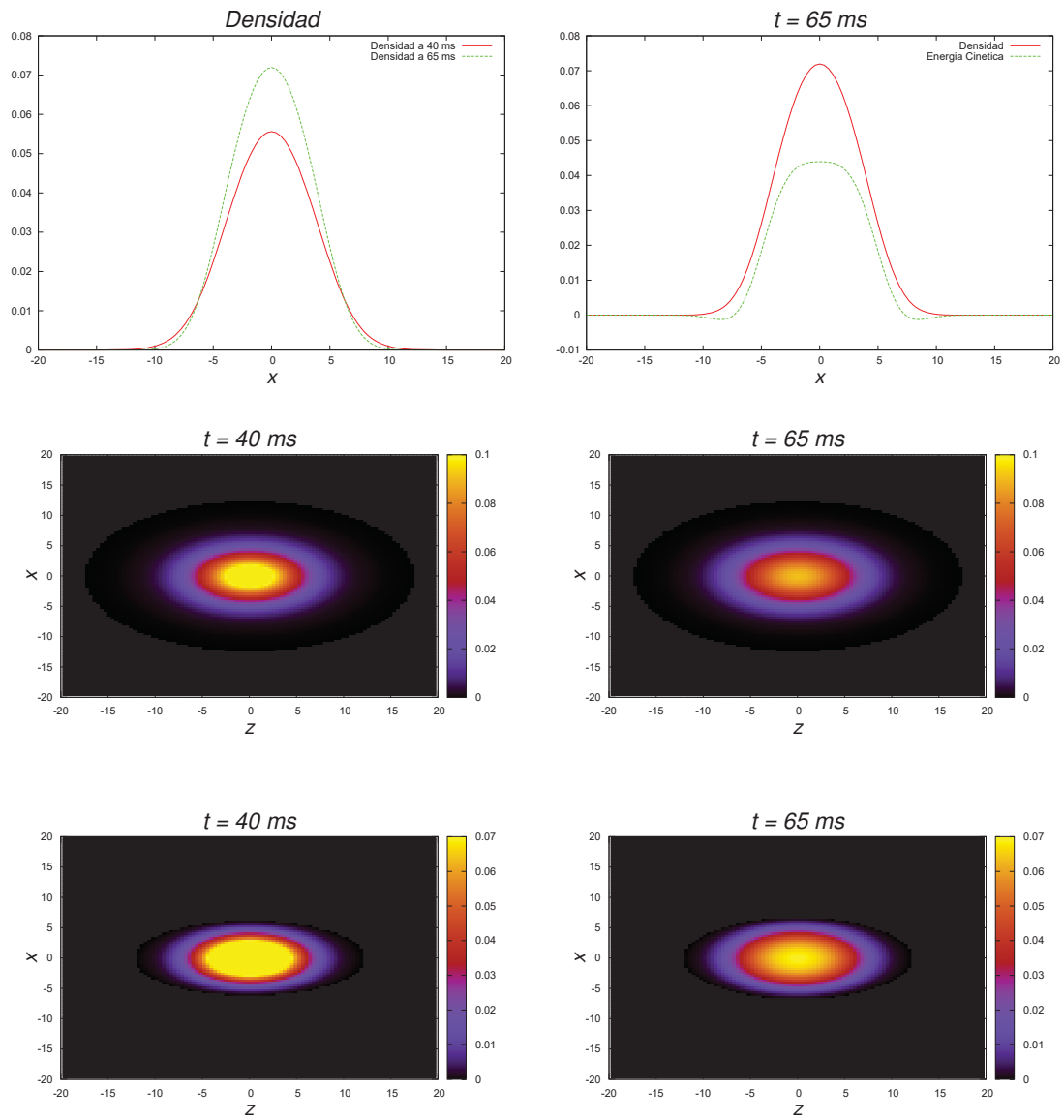


Figura 4.19: En la primera fila a la izquierda se muestra ρ a un tiempo antes de la formación del condensado, $\tilde{t} = 40$ ms, y al tiempo donde ocurre el BEC, $\tilde{t} = 65$ ms; en ella se ve que ρ tiene una mayor amplitud al tiempo $\tilde{t} = 65$ ms, mientras la gráfica de la derecha muestra a ρ y a K en el eje x al tiempo $\tilde{t} = 65$ ms. Por último en la segunda fila se muestra ρ y en la tercera fila se ve K , proyectadas en el plano xz . Estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y potencial al 90 %.

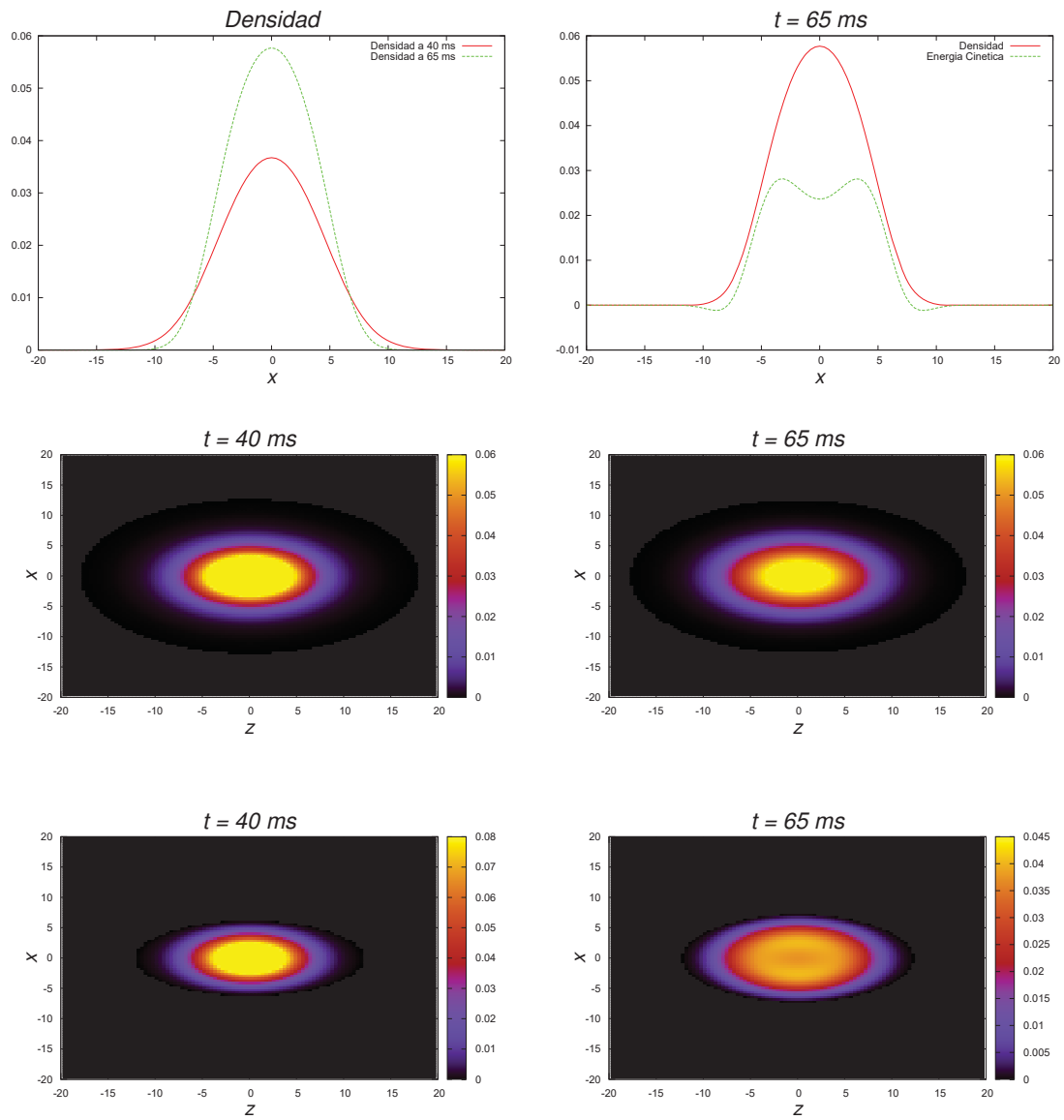


Figura 4.20: Se presenta en la primera fila la densidad y el integrando de la energía cinética a lo largo del eje x , en la segunda fila se muestra ρ proyectada en el plano xyz , mientras que en la tercera fila se muestra K en el mismo plano, al tiempo donde todos los átomos han sido incorporados $\tilde{t} = 40 ms$ y al tiempo donde se ha formado el condensado $\tilde{t} = 65 ms$ para el caso $N = 2000$ y potencial al 90 %.

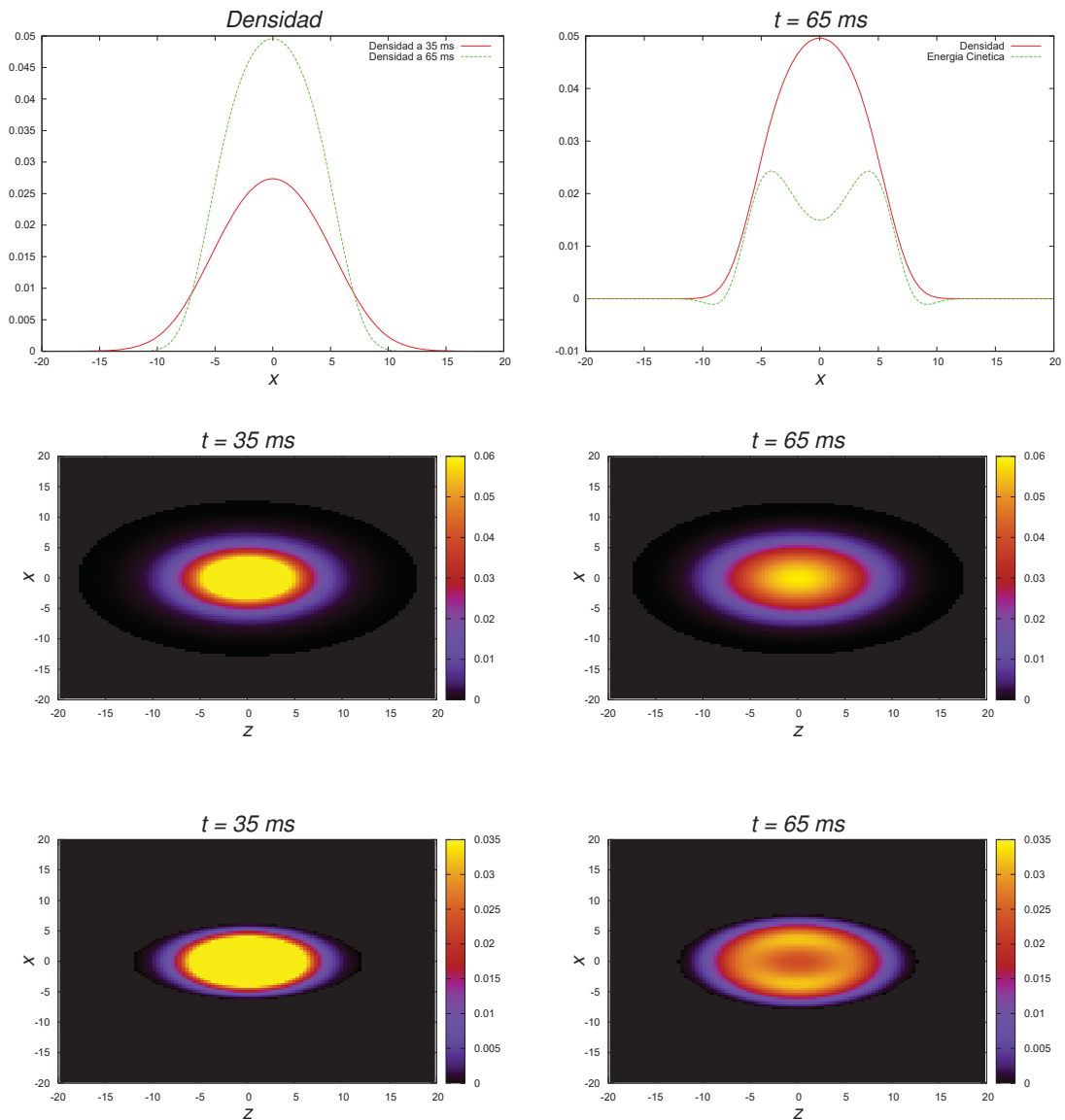


Figura 4.21: En la primera fila se presenta a la izquierda ρ a lo largo del eje x , al tiempo donde se han inyectado todos los átomos, $\tilde{t} = 35 \text{ ms}$, y al tiempo donde se debe ver el condensado, $\tilde{t} = 65 \text{ ms}$. En la gráfica de la derecha se muestra a ρ y a K en el eje x al tiempo $\tilde{t} = 65 \text{ ms}$. Finalmente en la segunda fila se muestra a ρ proyectada en xz y en la tercera fila se aprecia K en el mismo plano a los tiempos $\tilde{t} = 35 \text{ ms}$ y $\tilde{t} = 65 \text{ ms}$ para el caso $N = 3000$ y el potencial al 90 %.

Simulaciones con el potencial apropiado para simular la evaporación de átomos energéticos reduciendo el coeficiente a 50 %

Finalmente este experimento es el que corresponde con el proceso experimental realizado en [3]. Primero se enciende la trampa, que es anisotrópica debido a los láseres y al cuadrupolo magnético, segundo los átomos son incorporados a la trampa; y tercero se comienza el proceso de evaporación de los átomos más calientes mediante la reducción del factor $H(t)$ del potencial un 50 %.

En la Figura 4.22 se muestra la densidad central a lo largo del tiempo. Al igual que en el caso anterior aparece el pico en las tres curvas. Se ve que la densidad máxima es menor que para los dos experimentos anteriores. Reducir el potencial hasta la mitad de su capacidad provoca que el proceso de evaporación lleve más tiempo, por lo que toma más tiempo observar la aparición del pico.

Por otra parte, en las Figuras 4.23, 4.24 y 4.25 se presentan los cambios que sufrieron ρ y K con este cambio en el potencial (en forma de mapas de colores) y de esta manera se puede identificar en que casos hubo evidencia de la formación del BEC. Para 2000 y 3000 átomos la formación del BEC es evidente debido a que la energía cinética es baja cuando la densidad es alta. Por otra parte, para 1000 átomos no hubo formación de un condensado.

Al comparar con las imágenes tomadas de [3] mostradas en el capítulo 2, donde efectivamente se puede apreciar que los átomos con energías bajas se encuentran localizados en el centro, rodeados por aquellos que tienen energías más elevadas. En las Figuras anteriores se aprecia un comportamiento análogo, la densidad es más alta en el centro de la trampa, mientras que a los alrededores se encuentran densidades más bajas. Y además se verifica que la energía cinética es baja en el centro, tal como se esperaba.

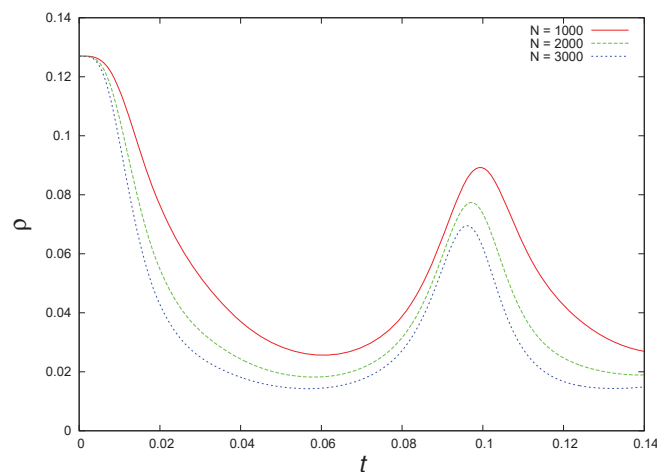


Figura 4.22: Se observa el comportamiento de $\rho(0, 0, 0, t)$ a lo largo del tiempo para $N = 1000$, $N = 2000$ y $N = 3000$ con un potencial de 50 % de su capacidad. Esto permite identificar el momento en que se forma el BEC y el valor máximo de la densidad para cada valor de N .

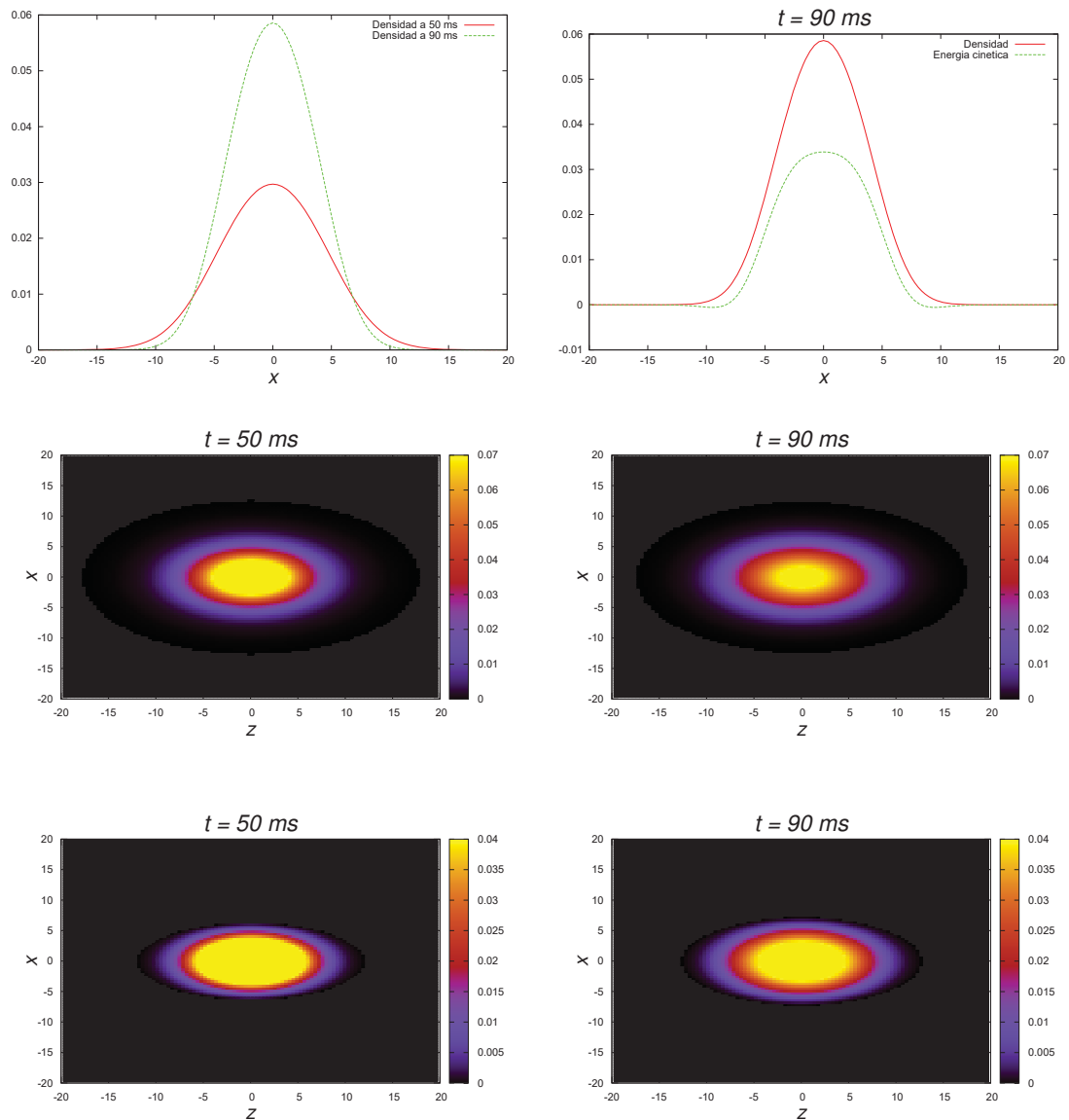


Figura 4.23: Se presenta ρ y K antes de la aparición del condensado, es decir cuando se termina de inyectar a los átomos, $\tilde{t} = 50 \text{ ms}$, y en el momento de la formación de éste, $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$. En la primera fila, a la izquierda se muestra ρ al tiempo $\tilde{t} = 50 \text{ ms}$ y al tiempo $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$ observando que ρ tiene una amplitud más grande en el momento de la formación del condensado que la que presenta antes de su aparición; y en la gráfica de la derecha se muestra ρ y K a lo largo del eje x al tiempo $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$. En la segunda fila se muestra ρ y en la tercera fila se muestra K , ambas cantidades proyectadas en el plano xz . Estas gráficas corresponden al caso $N = 1000$ y potencial al 50 %.

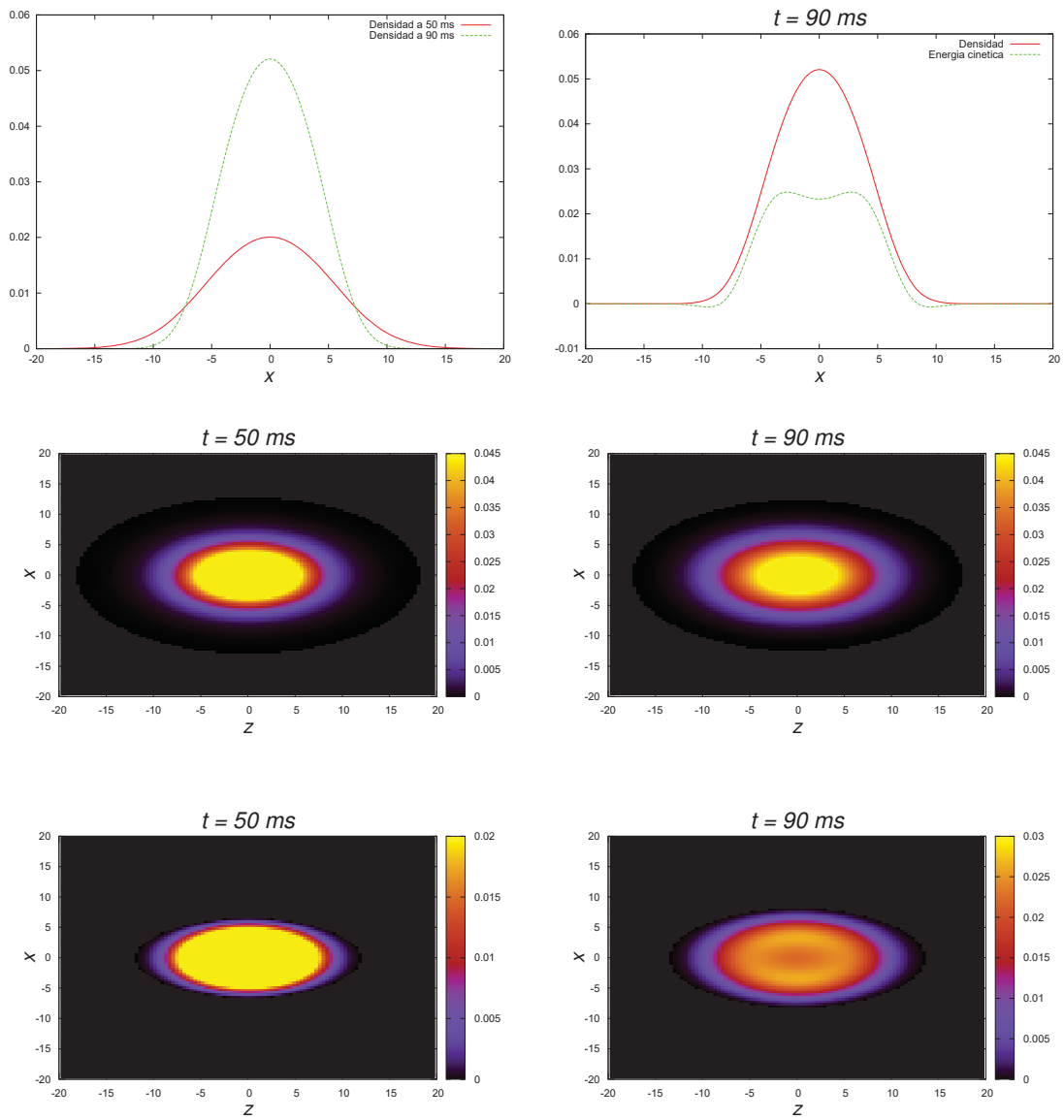


Figura 4.24: En estas figuras se muestra la densidad y el integrando de la energía cinética a lo largo del eje x y en el plano xz , para el caso $N = 2000$ y potencial al 50%. La segunda fila corresponde a ρ y la tercera fila corresponde a K .

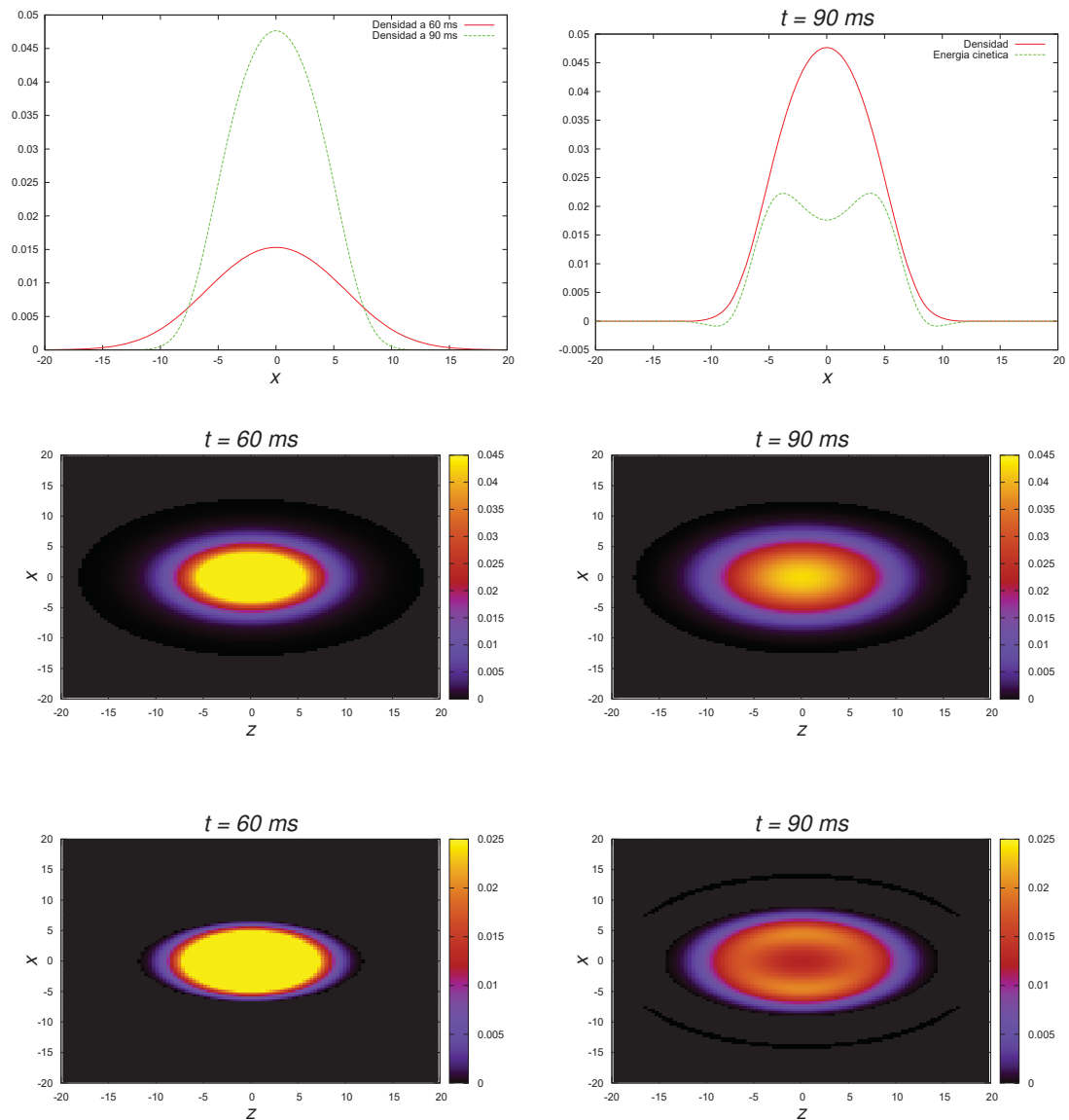


Figura 4.25: En la primera fila se muestra la densidad cuando todos los átomos han sido incorporados a la trampa, $\tilde{t} = 60 \text{ ms}$, y al tiempo donde se ha formado el condensado, $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$. En la gráfica de la derecha se muestra ρ y K a lo largo del eje x al tiempo $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$. La segunda fila corresponde a la densidad y la tercera fila muestra a K , ambas son proyectadas en el plano xz al tiempo $\tilde{t} = 60 \text{ ms}$ y al tiempo $\tilde{t} = 90 \text{ ms}$ para el caso $N = 3000$ y el potencial al 50%.

Comparando los resultados obtenidos en las simulaciones con 2000 y 3000 átomos con el resultado obtenido en [3], como se puede ver en la Figuras 4.26 y 4.27, se ve que se ha logrado simular el BEC. La nube mostrada en las gráficas de la izquierda de cada Figura

presenta una zona donde la densidad es alta en el centro rodeada por densidades más bajas, tal como se ve en la Figura de la derecha. Para $N = 2000$ la formación del BEC se asemeja más a los resultados experimentales.

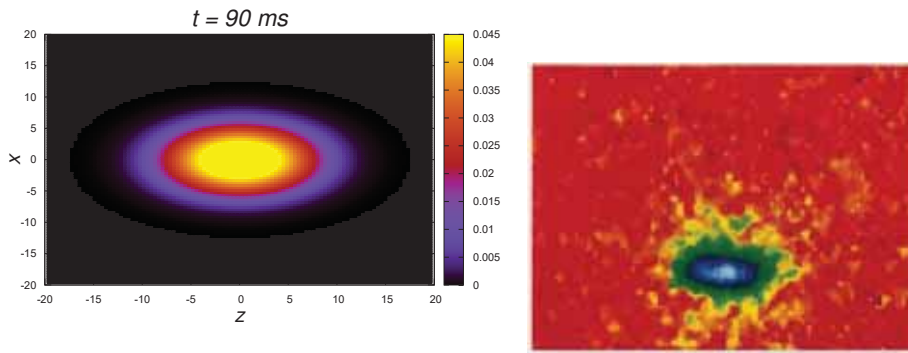


Figura 4.26: Se muestra una comparación entre los resultados obtenidos en la simulación numérica (izquierda) y los resultados mostrados en [3] (derecha) para el caso con 2000 átomos.

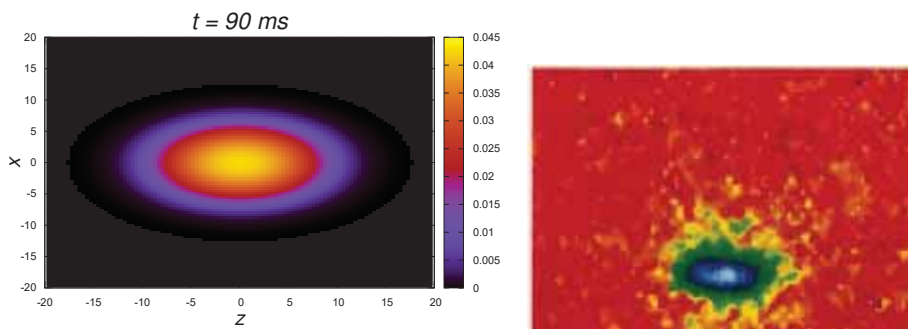


Figura 4.27: Se muestra una comparación entre los resultados obtenidos en la simulación numérica (izquierda) y los resultados mostrados en [3] (derecha) para el caso con 3000 átomos.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se describe el proceso experimental mediante el cual se obtuvo el primer BEC en un gas diluido de átomos de Rb-87 y el modelo numérico asociado. El objetivo fue identificar cada uno de los pasos seguidos en el procedimiento experimental con el fin de tener una relación con el modelo numérico asociado. Encontrándose así que los pasos fundamentales son:

- 1 Encender la trampa armónica generada por los láseres y el cuadrupolo magnético; es decir poner el potencial hasta su máximo valor, lo que equivale a que la función $H(t)$ que multiplica al término del potencial en la ecuación de GP sea igual a 1.
- 2 Agregar los átomos a la caja donde serán confinados por la trampa armónica, una vez que todos los átomos están dentro de la trampa se inicia el proceso de evaporar los átomos con mayor energía cinética. En el modelo numérico esto se simula haciendo que la función $G(t)$ que multiplica al término no lineal de la ecuación de GP aumente lentamente, lo que corresponde a agregar los átomos. Por otra parte, $H(t)$ disminuye hasta la mitad de su capacidad, lo que indica el proceso de evaporar los átomos más calientes.
- 3 La nube de átomos obtenida se deja expandir por un lapso de tiempo, después del cual repentinamente los átomos que quedaron dentro de la trampa se concentrarán en el centro de dicha trampa, formando el BEC dependiendo del número de átomos y de cuanto se disminuye el potencial para liberar los átomos más energéticos. En el modelo numérico, en el instante en que $H(t)$ se ha reducido a la mitad de su capacidad, la función se mantiene constante en ese valor durante el tiempo restante de evolución y es en ese lapso que se identifica la aparición del BEC.

Una vez que se tuvo clara la relación entre el proceso experimental y el modelo numérico, se hicieron simulaciones con el programa que se construyó para tal propósito y se compararon los resultados.

Se presentó una descripción detallada de los métodos numéricos que se utilizaron para resolver la ecuación de GP dependiente del tiempo, que no solamente se basan en diferencias finitas, sino que incorporan el refinamiento de mallas para obtener una mejor resolución en la región donde se concentra la nube de átomos.

Para verificar que el código construido funcionaba correctamente se realizaron pruebas utilizando distintas versiones de la ecuación de Schrödinger que poseen soluciones exactas, la partícula en una caja y la partícula con un potencial de oscilador armónico. Los resultados obtenidos concordaron con lo predicho por la teoría y se mostró la eficiencia de usar niveles de refinamiento en la malla.

Finalmente se simuló la formación del BEC obtenido en [3]. El BEC fue simulado utilizando parámetros numéricos que corresponden con los parámetros físicos. La gráfica obtenida para la densidad en el plano xz es similar a la Figura 2.6 que fue tomada de [3] y se encontró que efectivamente el BEC se forma en una zona que presenta alta densidad y baja energía cinética.

Bibliografía

- [1] Legget, Anthony J., Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts, *Reviews of Modern Physics*, Vol. 73, No. 307 (April 24, 2001).
- [2] Zapf, Vivien and Jaime, Marcelo and Batista, C. D. Bose-Einstein condensation in quantum magnets, *Reviews of Modern Physics*, Vol. 86, No. 563 (May, 2014), pp. 563–614.
- [3] M. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor *Science, New Series*, Vol. 269, No. 5221 (Jul. 14, 1995), pp. 198-201.
- [4] M. Holland and J. Cooper, Expansion of a Bose-Einstein condensate in a harmonic potential, *Phys. Rev. A*, Vol. 53, No. 4 (April, 1996), pp. R1954-R1957.
- [5] Phillips, D. William, Laser cooling and trapping of neutral atoms, *Reviews of Modern Physics*, Vol. 70, No.3, (July 1998), pp. 721-741.
- [6] K. Huang, *Statistical Mechanics 2nd Edition* (Wiley, New York, 1987)
- [7] W. Petrich, M. H. Anderson, J. R. Ensher, E. A. Cornell, Stable, Tightly Confining Magnetic trap for Evaporative Cooling of Neutral Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3352 (1995).
- [8] F. S. Guzmán, Solución de la ecuación de onda como un problema de valores iniciales usando diferencias finitas. *Rev. Mex. Fis.* **E 56** (2010) pp. 51-58
- [9] F. S. Guzmán, Solving the time-dependent Schrödinger equation using finite difference methods. (May 19, 2016)
- [10] F. S. Guzmán, Fixed Mesh Refinement 1D driver (April 1, 2013).
- [11] M. J. Berger and J. Oliger, *J.Comp.Phys.* **53** 484(1984).
- [12] David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. U.S.A, Prentice Hall (1995).