

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Departamento de Óptica



**FENÓMENOS NO LINEALES EN ONDAS DE MATERIA Y
DE LUZ**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR

PRESENTADA POR

Juan José García Ripoll

Bajo la dirección del doctor

Victor M. Pérez - García

Madrid, 2001

ISBN: 84-669-1736-5

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS



**FENÓMENOS NO LINEALES
EN ONDAS DE MATERIA Y DE LUZ:**

Condensados de Bose–Einstein y
solitones ópticos

Juan José García Ripoll

Memoria presentada para optar
al título de Doctor en Ciencias Físicas

Dirigida por
D. Victor M. Pérez–García

ÍNDICE GENERAL

1. Agradecimientos	7
Parte I Ondas de materia	1
2. Condensados de Bose–Einstein	3
2.1 Superfluidez y condensación de Bose–Einstein	4
2.1.1 Antecedentes históricos	4
2.1.2 Superfluidez y sonido	8
2.1.3 Superfluidez y viscosidad	10
2.1.4 Superfluidez y rotación	11
2.2 Teoría de campo medio	15
2.2.1 Ecuaciones de Schrödinger no lineales en CBE	15
2.2.2 La ecuación de Gross–Pitaevskii	16
2.2.3 Formulación de Lagrange	20
2.2.4 Estados estacionarios	21
3. Vórtices en CBE: teoría y resultados fundamentales	23
3.1 Soluciones con vorticidad en trampas esféricas	24
3.1.1 Estados vórtice simétricos	24
3.1.2 Búsqueda numérica de estados estacionarios	25
3.1.3 Resultados en trampas estacionarias	29
3.1.4 Resultados en trampas rotantes	29
3.2 Estabilidad de vórtices en trampas esféricas	31
3.2.1 Nociones de estabilidad	31
3.2.2 Ecuaciones de estabilidad lineal	32
3.2.3 Caracterización de los puntos críticos	33
3.2.4 Algoritmo numérico para el estudio de la estabilidad lineal	34
3.2.5 Resultados analíticos	36
3.2.6 Estabilidad lineal de vórtices simétricos	39
3.2.7 Estabilidad dinámica	42
3.3 Conclusiones	43

4. Vórtices en CBE: generación en trampas asimétricas	45
4.1 Introducción	46
4.2 Modelos matemáticos	47
4.3 Estabilidad e histéresis	49
4.4 Búsqueda de estados fundamentales	53
4.5 Conclusiones	57
5. Vórtices en CBE: sistemas de dos componentes	59
5.1 Motivación	60
5.2 Monopolos en condensados de Bose–Einstein	61
5.2.1 El modelo de anillo	61
5.2.2 Modelos tridimensionales	66
5.2.3 Montaje experimental	69
5.3 Los experimentos de Colorado	71
5.3.1 Teoría de campo medio	72
5.3.2 Estados estacionarios	73
5.3.3 Análisis de estabilidad lineal	74
5.3.4 Análisis de estabilidad global	76
5.3.5 Conclusiones	78
6. Hidrodinámica de condensados	79
6.1 Condensados rotantes	80
6.2 Estados estacionarios	82
6.3 Variables de Madelung	82
6.4 Soluciones analíticas	83
6.5 Superfluidez sin vórtices	85
6.6 Nucleación del primer vórtice	88
6.7 Simulaciones numéricas	89
6.8 Conclusiones	93
Parte II Ondas de luz	95
7. Solitones dipolares en medios saturables	97
7.1 Introducción	98
7.2 Existencia y estabilidad de solitones vectoriales	100
7.2.1 Las ecuaciones	100
7.2.2 Solitones vectoriales de tipo vórtice	100
7.2.3 Estabilidad del vórtice vectorial	102
7.2.4 Solitones vectoriales tipo dipolo	103
7.3 Dinámica de colisiones de solitones dipolares	105
7.3.1 Moléculas de luz	105
7.3.2 Análisis cualitativo	106
7.3.3 Colisiones entre solitón y dipolo	108

7.3.4	Colisiones entre dipolos	110
7.3.5	Resultados experimentales	111
7.4	Conclusiones	112
Parte III Métodos matemáticos en ec. de Schrödinger no lineales		113
8.	Descripción finito-dimensional de condensados de Bose-Einstein .	115
8.1	Modelos variacionales de dimensión finita	116
8.2	Las ecuaciones de momentos	118
8.3	Situaciones con ecuaciones cerradas	121
8.3.1	Ecuaciones de Newton para el centro de masas	121
8.3.2	Cierre de las ecuaciones en el caso lineal	122
8.3.3	Cierre de las ecuaciones con simetría radial	122
8.4	Aproximaciones en el método de momentos	123
8.4.1	Aproximación de divergencia uniforme	123
8.4.2	Aproximación de momentos independientes	125
8.5	Las ecuaciones de momentos en casos prácticos	126
8.5.1	Cualquier número de dimensiones con simetría radial	126
8.5.2	Cualquier número de dimensiones sin simetría	128
8.6	Conclusiones	129
9.	Estabilidad bajo perturbaciones periódicas	131
9.1	Resonancias extensas	132
9.2	Resonancias de Mathieu para el centro de masas	133
9.3	Evidencias numéricas de resonancias	135
9.3.1	Simetría radial	135
9.3.2	Potenciales asimétricos	138
9.4	Análisis de las ecuaciones de momentos	141
9.4.1	Resonancias exactas en problemas bidimensionales	141
9.4.2	Resonancias de barrera	142
9.4.3	Disipación	143
9.5	Conclusiones	146
10.	Energía libre no lineal y gradientes de Sobolev	147
10.1	Introducción	148
10.2	Gradientes de Sobolev	150
10.2.1	Soluciones directas del problema variacional	150
10.2.2	Gradientes ordinarios	151
10.2.3	Gradientes de Sobolev	151
10.2.4	Gradientes de Sobolev generalizados	152
10.3	Gradientes de Sobolev en espacios de Fourier discretos	153
10.4	Aplicaciones en Mecánica Cuántica	155
10.4.1	El problema	155

10.4.2	Evolución en tiempo imaginario	156
10.4.3	Minimización de la energía libre	157
10.4.4	Resultados numéricos	158
10.5	Aplicaciones en Óptica no lineal	160
10.5.1	El modelo	160
10.5.2	Soluciones estacionarias	161
10.5.3	Estados fundamentales	161
10.5.4	Estados excitados	162
10.5.5	Refinamiento de mallas y eficiencia	165
10.6	Existencia de mínimos en el funcional de energía libre no lineal . .	165
10.7	Conclusiones	170
 Parte IV Conclusiones		173
11. Conclusiones y vías de ampliación		175

1. AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mi agradecimiento a todos los que han contribuido moral y científicamente al desarrollo de este trabajo. En primer lugar quiero dar las gracias a mi familia por su apoyo en mi decisión de continuar la carrera académica y por ser ellos quienes han tenido que aguantar mis cambios de humor durante la gestación, desarrollo y publicación de los artículos que dan lugar a esta tesis.

En segundo lugar quiero dar las gracias a mi director de tesis, D. Victor M. Pérez-García, por su confianza en mi y en todas esas ideas disparatadas que al final resultaron ciertas. Sin su apoyo y sin sus continuados esfuerzos por conseguir los recursos técnicos necesarios, este trabajo no habría visto la luz.

Debo agradecer a Prof. D. J. Ignacio Cirac toda la atención prestada durante mi estancia en Innsbruck, así como su inestimable ayuda en mis primeros trabajos sobre defectos topológicos en condensados de Bose-Einstein.

Doy las gracias al Prof. Yuri Kivshar por darme la posibilidad de conocer Australia y por introducirme en la Óptica de medios saturables.

Por último agradezco al Prof. Vladimir V. Konotop las conversaciones que mantuvimos durante mi estancia en Lisboa y que han dado lugar a trabajos que, lamentablemente, no han podido ser incluidos en esta tesis.

Parte I

ONDAS DE MATERIA

2. CONDENSADOS DE BOSE–EINSTEIN

Resumen

En este capítulo introductorio repasamos la noción de superfluidez estudiando como se concretó a lo largo de los años en los estudios con la fase superfluida del ^4He , y precisando las motivaciones que llevaron a la búsqueda de condensados de Bose–Einstein gaseosos. Tras repasar brevemente las líneas de investigación con condensados desarrolladas en los últimos años, enunciaremos la teoría de campo medio que servirá de base para el resto de esta primera parte.

2.1 Superfluidez y condensación de Bose–Einstein

2.1.1 Antecedentes históricos

Alrededor del año 1937, el premio Nobel P. L. Kapitza¹ perfeccionó las técnicas de Kammerling–Ohnes para la licuefacción del helio y concluyó el desarrollo de una nueva máquina capaz de enfriar el ^4He por debajo de los 2.2 grados Kelvin. Al realizar los primeros experimentos con este ingenio, él y sus ayudantes observaron con asombro que el helio contenido en la máquina compresora se escapaba a través de los poros del material cerámico que lo contenía. Desde entonces, a la propiedad de fluir por aberturas extremadamente pequeñas se sumaron otros descubrimientos: velocidades anómalas para la propagación del sonido, ausencia de viscosidad, nula resistencia a objetos que se mueven en su seno, extraños mecanismos para la propagación del calor, etc. Resultaba evidente el hallazgo, si no de un nuevo estado de la materia, al menos de un nuevo tipo de fase líquida libre de la inercia y los mecanismos disipativos que atenazan el flujo de otras sustancias, lo que con el tiempo recibió el nombre de “superfluido”.

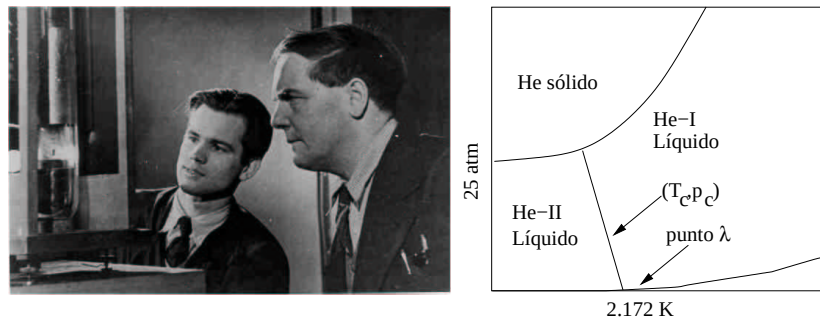


Fig. 2.1: En la foto de la izquierda vemos a P. Kapitza frente a un experimento con He-II. En la gráfica de la derecha se esquematiza el diagrama de fases para el isótopo ^4He en función de la temperatura y la presión.

¹ Piotr Leonídovich Kapitza, Kronshtadt 1894–Moscú 1984, curiosamente recibió el premio Nobel de Física en 1978 por sus contribuciones “por sus inventos y descubrimientos en el área de la Física de bajas temperaturas”.

Pocos años antes, entre el 1935 y el 1937 los hermanos Fritz y Heinz London habían desarrollado una teoría de la superconductividad basada en la existencia de una “función de onda macroscópica”. Hacia el ya 1937 circulaban rumores sobre el descubrimiento de una nueva clase de transiciones de fase en el ^4He , en la cual el calor específico experimentaba una divergencia². También por esos años empezaban a aceptarse los resultados del trabajo de S. Bose y A. Einstein sobre la estadística de bosones a muy baja temperatura. Finalmente los primeros resultados sobre superfluidez vieron la luz en sendos artículos de P. Kapitza [69] y de Allen y Misener [3] en la revista *Nature*.

En ese mismo año, pocos meses después, Fritz London tuvo la clara visión de aunar todas estas ideas y aventurar la siguiente hipótesis: dado que los átomos de ^4He son bosones, en la transición de fase del He–I al He–II (que aún no tenían esos nombres) debe participar algún tipo de condensación de Bose–Einstein [79]. En posteriores reuniones con su amigo y físico experimental L. Tisza, este último dio un paso más hacia adelante afirmando [127] que el He–II debía de estar compuesto por un fluido ordinario y un fluido extraordinario o superfluido, resultado este último de la condensación de los átomos bosónicos de ^4He .

Para entender las ideas de London recordemos brevemente que Einstein predijo que, en un agregado de bosones indistinguibles sin interacción mutua, estas partículas tienden a ocupar los niveles de menor energía, pudiendo alcanzar el estado fundamental un grado de ocupación macroscópico si la temperatura está por debajo de un valor finito T_{CBE} . Este fue uno de los aciertos cuantitativos de la hipótesis de London, pues si se estima el valor de T_{CBE} para el helio, este sale del orden de magnitud de la temperatura a la que ocurre la transición de fase del He–II, esto es, $T = 2.2\text{K}$.

El segundo acierto surge de la naturaleza coherente del condensado de Bose–Einstein resultante: al encontrarse la mayoría de los átomos en el mismo estado fundamental, la totalidad del sistema puede describirse mediante una función de onda macroscópica, $\psi(\mathbf{r}, t)$. Esta función de onda define un fluido, dado por la densidad de probabilidad $|\psi|^2$, y el campo de velocidades $\mathbf{v} = \nabla \arg(\psi)$ que cumple muchas de las propiedades de un superfluido.

El problema de la teoría de London es que llegó en un mal momento, cuando el formalismo de funciones de onda se empezaba a abandonar en favor de una Mecánica Cuántica basada en operadores y estados. Además, aunque el modelo de dos fluidos de Tisza servía para explicar cualitativamente ciertos experimentos y predecir resultados espectaculares (como las ondas de temperatura descubiertas veinte años más tarde), las aportaciones de ambos físicos carecían de auténticas predicciones cuantitativas y representaban más bien el marco teórico en el que se debería desarrollar una teoría consistente sobre el helio líquido.

² Recordemos brevemente que el calor específico es la derivada de una propiedad macroscópica (la energía interna) y que por tanto en este tipo de transiciones no se produce una discontinuidad del potencial termodinámico sino una falta de derivabilidad.

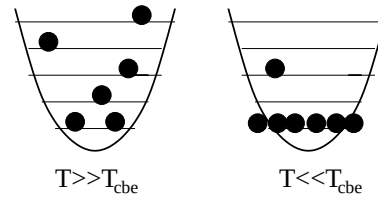


Fig. 2.2: Por debajo de la temperatura crítica, los bosones se acumulan en el estado fundamental.

En 1941 apareció un nuevo artículo [77] que cambiaría la mentalidad de los físicos que trabajaban en superfluidez. En dicho trabajo, escrito por L. D. Landau³ se desarrolla un nuevo modelo fenomenológico para el He–II. La teoría de Landau–Khalatnikov supone la existencia de un estado fundamental para el helio, que corresponde a la componente superflúida de L. Tisza. Este estado es susceptible de sufrir perturbaciones localizadas, dotadas de un momento lineal y una masa efectiva (la de los átomos involucrados en la excitación) y que a todos los efectos se comportan como un gas de “cuasipartículas”. Es precisamente el gas de cuasipartículas el que actúa como un fluido ordinario, participando en fenómenos de transporte, ondas sonoras y fenómenos disipativos.

La teoría de Landau–Khalatnikov supone el primer modelo fenomenológico con predicciones cuantitativas y con una cierta base microscópica. Por ejemplo, realizando hipótesis bastante sencillas sobre el espectro de excitaciones del estado fundamental, Landau es capaz de ajustar multitud de fenómenos experimentales como las velocidades anómalas del sonido en el He–II y la existencia de una velocidad crítica por debajo de la cual el superfluido ni reacciona ni experimenta fenómenos disipativos.

Sin embargo la escuela de Landau también cometió algunos errores. El más sencillo fue negar la posibilidad de que el superfluido exhiba rotación alguna. Asumiendo la naturaleza macroscópica de la función de onda colectiva del superfluido y que el campo de velocidades en Mecánica Cuántica depende de la fase de esta función, Landau llegó a la conclusión *errónea* de que el flujo de helio debía ser irrotacional

$$\mathbf{v} = \nabla \arg(\psi) \Rightarrow \nabla \times \mathbf{v} = 0 \text{ (!!!)}.$$

Naturalmente, este tipo de flujos excluye cualquier rotación excepto algunas corrientes espirales muy lentas en recipientes muy deformados (Véase el Capítulo 6). Este error fue corregido en los años 60 por R. P. Feynmann, quien formuló la hipótesis de que la circulación del superfluido en realidad está cuantizada y no tiene por qué ser nula

$$\oint \nabla \times \mathbf{v} = m 2\pi, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

de forma que las contribuciones a esta circulación provienen de singularidades en la fase de la función de ondas.

El segundo error y quizás el más importante consistió en despreciar los trabajos de London sobre superfluidez y desdechar la hipótesis de que la componente superflúida del He–II es en realidad un condensado de Bose–Einstein. Recordemos que por aquellos años el único modelo teórico conocido de condensado de Bose–Einstein partía de la hipótesis de un gas ideal, sin interacción, mientras que el He–I y el He–II son líquidos donde las interacciones de corto alcance juegan un

³ Lev Dávidovich Landau, Baku 1908–Moscú 1968, recibió en 1961 el premio Nobel de Física por sus avances en el estudio de la materia condensada y en particular por sus aportaciones a la comprensión del helio líquido.

papel primordial. Así pues no es de extrañar que Landau considerara imposible o al menos incorrecta la construcción de una teoría microscópica de la superfluidez partiendo de la estadística de bosones.

Sin embargo esta última idea, que podemos denominar el "programa London", era la correcta, aunque no precisamente fácil de realizar, como demostró N. N. Bogoliubov en 1947 con un trabajo [10] donde desarrolla la teoría de muchos cuerpos de un gas o un líquido de bosones. En este artículo se demuestra que las interacciones no cambian demasiado el fenómeno de la condensación, limitándose a introducir correcciones cuantitativas sobre magnitudes como la temperatura crítica o la velocidad del sonido. Además la teoría de Bogoliubov resalta por primera vez la importancia del fenómeno de la condensación como una ruptura de simetría que introduce una coherencia, si no total, al menos local en el sistema, donde el parámetro de orden surge del valor esperado del operador bosónico $\langle\psi(\mathbf{r})\rangle$ sobre el estado fundamental del condensado.

Si bien el artículo de Bogoliubov tardó al menos 10 años en tener algún eco en la comunidad científica, a partir de entonces se vivió una especie de era dorada en el estudio de la condensación de Bose–Einstein [53]. Por un lado vemos el nacimiento de una línea de investigación dedicada al estudio del ^4He desde un punto de vista microscópico, un problema formidable tanto desde el punto de vista teórico como por la artillería computacional necesaria para tratarlo.

Por otro lado nos encontramos una comunidad de científicos que empiezan a estudiar el caso mucho más sencillo de un gas de bosones débilmente interactuante. Lo que nació como un modelo académico, fácil de manejar, condujo en poco tiempo a la predicción de fenómenos interesantísimos que podemos calificar de manifestaciones macroscópicas de un sistema cuántico. De esta época destacamos el trabajo de L. P. Pitaevskii [104], donde se introduce por primera vez de forma rigurosa el concepto de función de onda macroscópica dependiente del tiempo. Es decir, Pitaevskii ya no se limita a considerar el superfluido como el estado fundamental estacionario de Bogoliubov y Landau. Antes bien, nos enseña que el condensado tiene una dinámica propia, que ésta puede ser deducida a partir de argumentos microscópicos y que responde a la llamada ecuación de Gross–Pitaevskii [54, 104]

$$i\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U|\psi|^2\psi.$$

Una ecuación donde encontramos la interacción promedio entre átomos $U = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ originando un término no-lineal nuevo en la Mecánica Cuántica.

El interés por los resultados analíticos derivados de la teoría de condensados gaseosos llevó a numerosos grupos experimentales a intentar generar estos condensados. Esta carrera que comenzó en el MIT en experimentos con hidrógeno [39] tuvo sus primeros ganadores en los condensados de ^{87}Rb [6] y ^{23}Na [30]. Desde entonces hemos sido testigos de la realización de experimentos bellísimos en los que se manipulan estos condensados de formas inimaginables. Experimentos que producen vórtices observables a simple vista, experimentos de interferencia entre condensados y auténticas medidas de la fase de la función de onda, así como

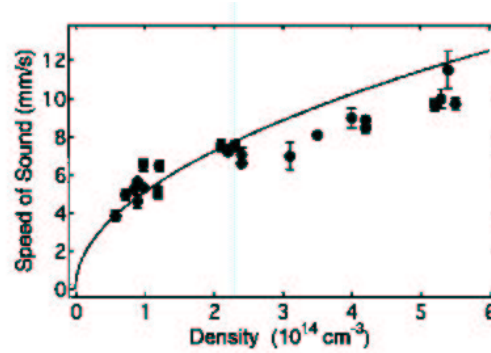


Fig. 2.3: Velocidad de propagación del sonido en un condensado de sodio alargado a muy baja temperatura [7] en función de la densidad media de la nube atómica.

toda una serie de trabajos que vienen a confirmar la relación entre superfluidez y condensación. En los siguientes capítulos se expondrán trabajos teóricos contemporáneos (y en algunos casos precursores) de estos experimentos, en los que se estudian las propiedades rotacionales del condensado y cómo se manifiesta la superfluidez en ellos. Sin embargo, antes de entrar de lleno en materia, repasaremos algunas de las líneas de investigación actuales, detallando cuales son los resultados experimentales más relevantes y repasando el formalismo matemático que servirá de base al resto de esta primera parte.

2.1.2 Superfluidez y sonido

Una de las primeras experiencias realizadas con He-II consistió en estudiar la propagación del sonido en el seno del líquido. En un fluido ordinario una onda sonora consiste en un cambio de la densidad que se desplaza con una cierta velocidad, uniforme si la perturbación es pequeña. Sin embargo en los trabajos con He-II se encontró que una misma perturbación es capaz de excitar no una, sino al menos dos ondas sonoras:

- la onda ordinaria, con una velocidad de propagación independiente de la temperatura; y
- una onda extraordinaria, más rápida cuanto menor es la temperatura media y asociada con cambios locales de la temperatura del helio.

El fenómeno de los dos sonidos se explica perfectamente con el modelo de dos fluidos propuesto por L. Tisza en 1938 [127]. En dicho modelo la componente normal del He-II es responsable de la onda ordinaria u onda de presión, mientras que el superfluido participa en la onda extraordinaria en una cantidad que depende de su densidad y por tanto de la temperatura. Denotando por $n_s(\mathbf{x}, t)$ y $\delta n_s(\mathbf{x}, t)$

la densidad de superfluido y las variaciones asociadas a la onda sonora, la teoría de Landau–Khalatnikov llega a la siguiente ecuación de ondas inhomogénea para el sonido extraordinario

$$\frac{\partial^2 \delta n_s}{\partial t^2} \simeq \nabla [c(\mathbf{x}, t) \nabla \delta n_s] \quad (2.1)$$

$$c = \sqrt{\frac{g n_s(\mathbf{x})}{m}}. \quad (2.2)$$

Este mismo modelo para la propagación del sonido se ha visto corroborado también en experimentos con condensados gaseosos. En estos experimentos se produce un solitón gris en el condensado mediante la aplicación de un láser de frecuencia apropiada. Al no imprimir una fase apropiada en la función de onda, la depresión en la densidad da lugar a dos ondas sonoras que se propagan en sentidos opuestos con velocidad aproximadamente constante. En este caso la cantidad de

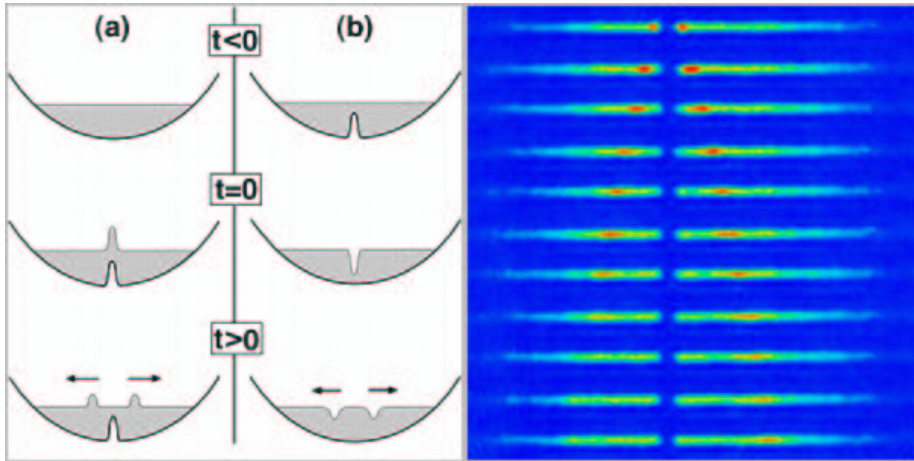


Fig. 2.4: Aplicando un láser desintonizado hacia el azul, partimos el condensado en dos. Esta perturbación es inestable y da lugar a ondas sonoras cuya velocidad podemos medir.

átomos no condensados es demasiado pequeña para excitar el primer sonido, pero se puede comprobar, en el caso de condensados muy alargados, que pequeñas perturbaciones se propagan de acuerdo con una variante de la ecuación (2.1). En la gráfica 2.3 mostramos el excelente acuerdo entre el ajuste parabólico (2.1) y las medidas experimentales [7] — las pequeñas diferencias se deben al carácter inhomogéneo del condensado, cuya densidad en equilibrio varía espacialmente.

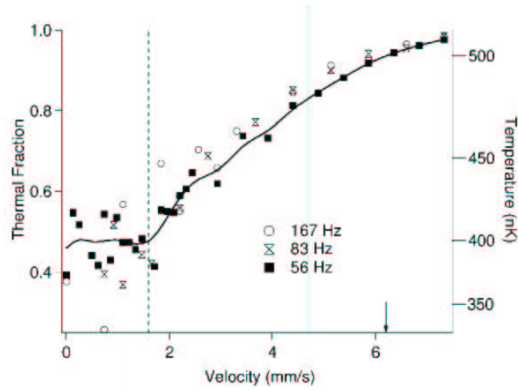


Fig. 2.5: Por debajo de una velocidad crítica, la agitación del condensado no tiene resultados visibles. Por encima de la velocidad, se activa mecanismos disipativos que dan lugar a la excitación de átomos que pasan a formar parte de la fracción no condensada.

2.1.3 Superfluidez y viscosidad

La propiedad más interesante del He-II, y probablemente la más espectacular, es su relativa insensibilidad a perturbaciones externas que no excedan una determinada intensidad. Por ejemplo, un agitador que se mueva en una cubeta de He-II lo hace sin resistencia (y por tanto sin viscosidad aparente) a menos que exceda una cierta velocidad crítica. Esta ausencia de interacción permite por un lado el flujo a través de capilares y poros demasiado pequeños como para que pasen otros líquidos “más mojados”; pero además da lugar a una relativa estabilidad de las corrientes circulares que establezcamos en el seno del fluido.

La razón fundamental para la existencia de una velocidad crítica la encontramos en el espectro de excitaciones del superfluido. Recordando la teoría de Landau, el He-II se forma a partir de un estado fundamental y sus perturbaciones. Estas últimas son las responsables de la interacción entre el superfluido y el medio; en consecuencia, cuando el sistema gana energía o la pierde podemos considerar que se crean o se destruyen cuantos de excitación. Lo que Landau supuso y Bogoliubov confirmó es que el límite de baja energía del espectro del He-II corresponde a fonones con un espectro similar al de las ondas electromagnéticas: $E(k) = \hbar\omega = \hbar c|\mathbf{k}|$. Esta relación lineal impide que en el helio se produzcan excitaciones con una velocidad inferior al cociente entre el cambio de energía y el momento lineal asociado a la excitación: $v_{min} = \Delta E/|\mathbf{k}| = c$.

La condición de Landau se traduce en dos implicaciones prácticas importante. Por un lado supongamos que disponemos un experimento de transporte en el que el He-II fluya a través de un capilar: siempre que el flujo se produzca a una velocidad inferior a $v_{min} = c$, ninguna impureza u obstáculo podrá frenar su flujo o restarle energía. Por otro lado podemos imaginar un experimento de agitación,

donde una o más palas sacuden el superfluido de una cubeta. De nuevo por la condición de Landau, si el agitador se mueve a una velocidad inferior a v_{min} , no experimentará ninguna resistencia, o más bien ésta será proporcional a la cantidad de fluido ordinario en el He-II.

El tamaño habitual de un condensado (unas pocas micras) convierte los experimentos de transporte en impracticables. La investigación actual se ha centrado en el estudio de la respuesta del condensado a obstáculos formados normalmente por láseres desintonizados que se propagan en el condensado intentado producir algún tipo de agitación [106]. El resultado medible es que por debajo de una velocidad de agitación el condensado ignora la presencia del láser y se acomoda a su movimiento, sin pérdida o ganancia de energía. Sin embargo, cuando aumentamos la velocidad del láser el condensado empieza a ganar energía y temperatura, con el resultado de un incremento en la fracción de átomos no condensados y una disminución en el tamaño de la nube condensada.

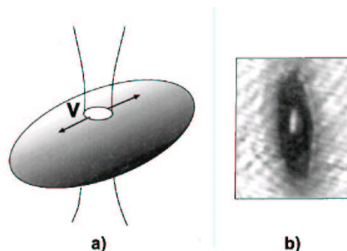


Fig. 2.6: Un láser del “color” apropiado se comporta como una cucharilla en el seno del condensado.

2.1.4 Superfluidez y rotación

Al agitar el café con una cuchara, al vaciar una bañera o al contemplar el avance de un remolino sobre la arena, estamos en realidad presenciando la capacidad de un fluido para experimentar rotación. La característica común a estos ejemplos es, sin embargo, la tendencia intrínseca del fluido al reposo: los mecanismos disipativos en los líquidos y gases ordinarios son tan poderosos que ninguno de ellos puede mantener el movimiento giratorio una vez cesan los gradientes de presión que lo originaron. Así resulta habitual contemplar cómo a medida que pasa el tiempo la velocidad de rotación decrece y el remolino, o el tornado, experimentan deformaciones de la línea de rotación que, inestable, termina por desaparecer.

Haciendo memoria es posible encontrar un conjunto de características que resumen el comportamiento de los fluidos ordinarios. Haciendo particular énfasis en los fenómenos de rotación, los puntos que más nos interesan son:

- Omnipresencia de la viscosidad. La interacción del fluido (gas o líquido) consigo mismo y con los elementos circundantes lleva al amortiguamiento de las corrientes y a fenómenos como el menisco en un capilar.
- Debido precisamente a la viscosidad, necesitamos un gradiente de presiones inducido externamente para generar y mantener la rotación. La respuesta del fluido a estos agentes externos suele ser además continua: a un par más intenso, mayor velocidad angular.

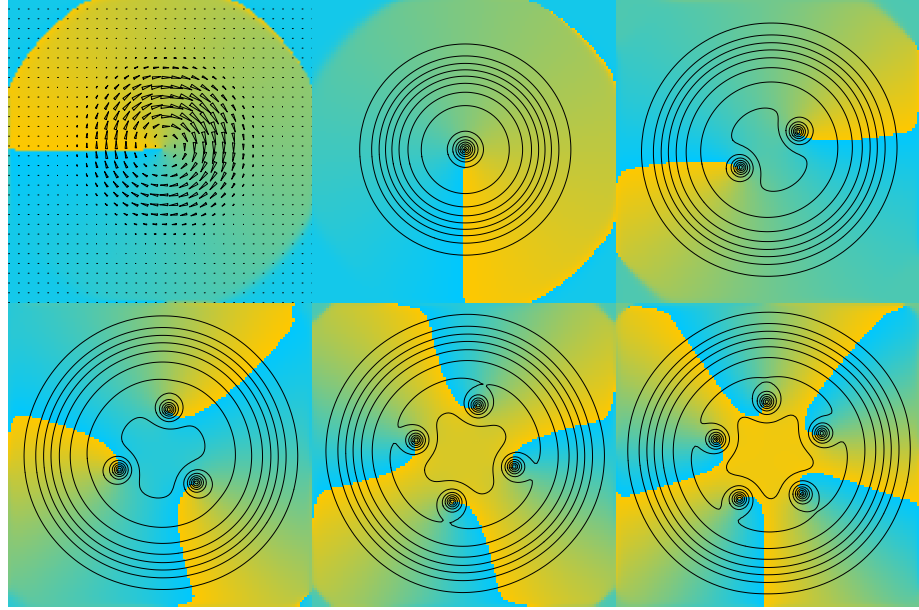


Fig. 2.7: Representación de la fase, $\theta(\mathbf{x}) \bmod 2\pi$, para varias distribuciones de vórtices. Las líneas cerradas son tanto líneas de densidad constante como líneas de flujo y en la primera gráfica representamos el campo de velocidades.

- En ausencia de turbulencia el fluido gira como lo haría un sólido rígido, almacenando energía cinética según el momento de inercia clásico, propio de un sólido rígido, $I^{normal} = \langle x^2 + y^2 \rangle$.
- El eje de rotación, lo que constituye el “ojo del huracán”, es inestable y sufre modulaciones longitudinales y transversales que inducen una dinámica no trivial sobre el mismo.
- A medida que nos alejamos del eje de rotación la velocidad tangencial crece y luego decrece, de manera que tanto en el ojo de rotación como en la periferia el fluido tiende a mantenerse en reposo.
- Sobre el eje de rotación siempre encontramos fluido que que las fuerzas de rotación no han sido capaces de desalojar.

Pese a la abundante literatura sobre el tema, porque resulta difícil encontrar una definición precisa de superfluidez. Esto es así por el término “superfluido” es en realidad un concepto vago, que se ha formado por contraste, al enfrentar las propiedades anteriormente enunciadas con los resultados experimentales de años de trabajo con el primer superfluido conocido, el He–II. Dependiendo del

campo en el que uno trabaje resulta incluso habitual enfatizar o despreciar algunas propiedades.

Existencia de velocidades críticas: Como mencionamos anteriormente, el superfluido presenta una respuesta anormalmente baja a todo tipo de perturbaciones externas y en general éstas deben ser lo bastante intensas como para inducir cambios significativos. Así, podemos desplazar lentamente obstáculos por el fluido sin producir disipación, pero también necesitamos girar un condensado muy rápido si deseamos que adquiera momento angular.

Momentos de inercia anómalos: Cuando intentamos inducir rotación en un superfluido, éste procura adaptarse con la distribución de velocidad más lenta posible. Un experimento clásico consiste en girar con velocidad uniforme, Ω , el recipiente que confina al superfluido para medir después el momento angular adquirido. Definiendo el momento de inercia como el cociente entre el momento angular, L_z , y la velocidad angular del recipiente, Ω , encontraremos que el valor superfluido es notablemente inferior al valor de un líquido ordinario

$$I_z^{super} \ll I_z^{normal} = \int \rho(x, y, z)(x^2 + y^2) dx dy dz.$$

Flujo irrotacional: Un superfluido perfecto presenta un campo de velocidades, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \nabla\theta(\mathbf{x}, t)$, que satisface la condición de Feynmann de cuantización de la circulación [38, 54, 104]

$$\oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = 2m\pi, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (2.3)$$

Vórtice o corrientes circulares: La forma más natural de introducir una rotación intensa en un superfluido es por medio de vórtices. Un vórtice es una línea de densidad nula alrededor de la cual el superfluido gira con velocidad cuantizada (2.3). Desde el punto de vista matemático el vórtice o la línea de vórtice es un conjunto de puntos sobre el cual no está bien definido el potencial de velocidades, $\mathbf{v} = \nabla\theta(\mathbf{x}, t)$, porque alrededor del vórtice θ presenta una discontinuidad múltiplo de 2π

$$\oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \oint \nabla\theta \cdot d\mathbf{l} = 2m\pi, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (2.4)$$

Como se muestra en la Figura 2.7, esta discontinuidad en realidad es un artificio matemático, que sólo tiene consecuencias indirectas sobre el campo de velocidades.

Ceros de la densidad: Desde el punto de vista más prosaico la línea de vórtice representa simplemente un eje de giro del fluido y por tanto resulta equivalente a un remolino de agua o a un tornado. Sin embargo la singularidad en

la fase $\theta(\mathbf{x}, t)$ da lugar a velocidades de rotación que divergen como $v \sim 1/r$ a medida que nos acercamos al núcleo del vórtice. Esta singularidad da lugar a la divergencia de la fuerza centrífuga, $F \sim mv^2/r$, capaz de desalojar todo el superfluido fuera de la línea de rotación. Así se cumple que el módulo de la función de ondas y la densidad presentan un cero sobre la línea de vórtice, $\sqrt{\rho} = |\psi| = \mathcal{O}(r)$, lo cual compensa desde el punto de vista matemático la indefinición de la fase y permite que la función de ondas $\psi(\mathbf{x}, t)$ tenga sentido.

Ausencia de viscosidad: La carencia de fenómenos disipativos, o su baja intensidad, tiene como consecuencia inmediata la estabilidad de las corrientes circulares o vórtices. Por analogía tal vez con la superconductividad, éste ha sido durante mucho tiempo el principal criterio de superfluidez, a la vez que el más difícil de comprobar.

Anteriormente, §2.1.1, avanzamos que una forma apropiada para describir el condensado consiste en la representación de London, donde una única función compleja describe la densidad de toda la nube atómica. Esta misma función de onda tiene por un lado una interpretación cuántica ($|\psi|^2$ es una densidad de probabilidad, trabajamos con ecuaciones de Schrödinger, etc), y por otro admite una interpretación hidrodinámica. Separando fase y módulo

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{i\theta(\mathbf{x}, t)},$$

encontramos que la función de onda combina una densidad, ρ , y un campo de velocidades, $\mathbf{v} = \nabla\theta$.

La belleza de esta representación radica en que cada propiedad matemática de la función de onda macroscópica $\psi(\mathbf{x})$ se traduce en una característica del flujo superfluido, y viceversa. En particular, cualquier función de onda es susceptible de albergar líneas de vórtice, satisface la condición de Feynmann (2.3), presenta una fuerza centrífuga divergente, etc.

Sin embargo es importante insistir que la superfluidez es algo más en involucra fenómenos de estabilidad en estas corrientes circulares y la posibilidad de inducir las mecánicamente. Pensemos, por ejemplo, que el condensado de Bose–Einstein ideal, sin interacción, puede albergar vórtices pero éstos no pueden ser generados mediante rotación (Véase §3.1.3).

En esta primera parte de la tesis nos interesaremos por la estabilidad de los vórtices en el marco de la teoría de campo medio para el condensado. En esta teoría la fracción no condensada (que constituye el fluido ordinario) es despreciable o bien se puede tratar desde el punto de vista lineal. Esta situación es radicalmente distinta a la que encontramos en el helio líquido, donde la fracción condensada oscila entre el 10% y el 20%. En el Capítulo 3 comenzaremos con el estudio de los vórtices en situaciones simétricas. En los Capítulos 4 y 5 estudiaremos configuraciones realistas de experimentos actuales [87, 81], presentando trabajos precursores que profundizan en la ruptura de simetría que representa la nucleación

de un vórtice. Por último en el Capítulo 6 estudiaremos los vórtices desde el punto de vista hidrodinámico, estudiando cómo se manifiesta la superfluidez en el momento de inercia.

2.2 Teoría de campo medio

2.2.1 Ecuaciones de Schrödinger no lineales en CBE

Al contrario de los modelos que describen nuestro entorno macroscópico, la Mecánica Cuántica es una teoría lineal, en la que los observables físicos vienen representados por operadores lineales que actúan sobre un espacio de estados posibles. La linealidad cobra tal importancia que el espacio de configuraciones se particiona en una serie de direcciones preferentes dadas por los autovectores de los observables, de manera que la medición consiste en revelar el sistema como perteneciente a uno y sólo uno de estos “autoestados”.

Las consecuencias de este carácter lineal son múltiples. Primero, el estudio de la realidad microscópica se convierte en algo de naturaleza estadística, sobre un conjunto discontinuo de estados. Así surgen conceptos como la función de onda, $\psi(\mathbf{r})$, una función compleja de variable real donde su módulo, $|\psi(\mathbf{r})|^2$, describe la probabilidad de encontrar una partícula en una determinada posición. Las ecuaciones de evolución surgen como combinaciones que involucran los diversos observables, y las simetrías del sistema caracterizan radicalmente tanto las ecuaciones como los estados físicos realizables.

¿Cómo llegamos, pues, al mundo físico que nos rodea, aparentemente continuo y dominado por los defectos y los fenómenos no-lineales? La transición se produce en escalas intermedias entre las dominadas por la Mecánica Cuántica y la Física Newtoniana. En el mundo mesoscópico encontramos sistemas complejos, compuestos de múltiples elementos —electrones, protones, átomos, moléculas— que interaccionan entre sí mediante las reglas de la Mecánica Cuántica, pero donde las ecuaciones comienzan a ser no-locales y no-lineales respecto de los operadores que las forman. En un segundo plano, la complejidad de estos sistemas, donde se combinan los estados de muchas partículas, comienza a diluir las particiones que los observables y las simetrías pudieran realizar sobre el sistema.

En este mundo mesoscópico es donde nos encontramos con las ecuaciones de Schrödinger no lineales, que rigen la dinámica de uno o más paquetes de onda y que dejan de ser lineales en la función de onda para incluir dependencias no-lineales y no-locales en la densidad de probabilidad $|\psi(\mathbf{r})|^2$.

Las ecuaciones de Schrödinger no lineales surgen de forma natural en el campo de la Óptica al estudiar la propagación de la luz en un medio de respuesta no-lineal, pero también han cobrado reciente importancia en la descripción de los condensados de Bose–Einstein atómicos. Estos sistemas se componen de átomos neutros de naturaleza bosónica (^{23}Na , ^{87}Rb , etc) a una temperatura lo bastante baja como para el estado de mínima energía tenga una probabilidad de ocupación macroscópica. El fluido cuántico resultante, o condensado de Bose–Einstein, viene

descrito por una función de onda mesoscópica, $\psi(\mathbf{r})$, y las ecuaciones cuánticas originales se reducen a una ecuación de Schrödinger no lineal, que en este contexto recibe el nombre de ecuación de Gross–Pitaevskii.

En los siguientes apartados esquematizaré el origen microscópico de la ecuación de Gross–Pitaevskii y sus principales propiedades matemáticas. Esta introducción servirá de base para reducciones finito–dimensionales tales como el método variacional o el método de momentos (Capítulo 8), así como para el estudio de diversos fenómenos en el condensado, como resonancias (Capítulo 9) y superfluididad (Capítulo 6).

2.2.2 La ecuación de Gross–Pitaevskii

En el marco de la segunda cuantización, un agregado diluido de bosones sin grados de libertad internos viene descrito por un hamiltoniano no–local y no–lineal en el operador bosónico, $\Psi(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} H = & \int \Psi(\mathbf{x})^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) \right] \Psi(\mathbf{x}) d^n x \\ & + \frac{1}{2} \int \int \Psi(\mathbf{x})^\dagger \Psi(\mathbf{y})^\dagger U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{y}) d^n x d^n y. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Hay dos elementos importantes en este hamiltoniano. El primero es el potencial que confina todo el gas, $V(\mathbf{x}, t)$. Desde el punto de vista experimental dicho potencial es aproximadamente armónico, esto es, responde a una forma cuadrática positiva

$$V(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2(t) x^2 + \omega_y^2(t) y^2 + \omega_z^2(t) z^2), \quad (2.6)$$

cuyas superficies equipotenciales son elipsoides. Cada uno de los tres ejes ortogonales de esta trampa tiene asociada una longitud característica que es la anchura del paquete de ondas de un bosón aislado en el seno del potencial. Dicha longitud es función de la masa del bosón y de la frecuencia correspondiente, ω_i ,

$$a_i = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m\omega_i}}, \quad i = x, y, z. \quad (2.7)$$

Desde el punto de vista experimental las trampas que confinan a los condensados suelen generarse mediante campos magnéticos [58] y puede que algún elemento óptico [81]. En cualquier caso se trata de dispositivos bastante flexibles [58], ajustables para obtener trampas achatadas o alargadas [81], esféricas [4], axialmente simétricas o completamente deformadas. Desde el punto de vista matemático resulta conveniente reescribir el potencial de forma que se manifiesten las simetrías del problema. Introduciremos una medida del confinamiento transversal, $\omega_\perp$, una medida de la deformación transversa, ε , y otra de la elongación de la

trampa, γ

$$V(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 [(1 - \epsilon)x^2 + (1 + \epsilon)y^2 + \gamma z^2]. \quad (2.8)$$

Combinando estos valores obtenemos las siguientes geometrías

ϵ	γ	Geometría
$= 0$	1	Esférica
$= 0$	> 1	Oblata
$= 0$	< 1	Prolata
$\neq 0$	$\neq 1$	Asimétrica

El segundo elemento importante en el hamiltoniano es la interacción entre bosones. Los experimentos actuales se realizan en un régimen diluido, en el que las colisiones entre átomos son infrecuentes y principalmente elásticas a dos cuerpos. Esto nos permite realizar una segunda aproximación que consiste en reemplazar la interacción no-local por un potencial de contacto efectivo, donde el único parámetro libre es la longitud de scattering en onda-s, a ,

$$U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \equiv U_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.9)$$

Un valor positivo de la longitud de scattering, $a > 0$, representa un potencial repulsivo entre bosones que da lugar a configuraciones relativamente estables con sodio (^{23}Na) y rubidio (^{87}Rb). Los valores negativos de la longitud de scattering surgen en el estudio de condensados de litio (^7Li) y cesio (^{133}Cs), y en átomos con interacciones ajustables mediante el efecto Feshbach [37].

En el caso atractivo un número excesivo de bosones lleva a un colapso del condensado, a pérdidas por colisiones a tres cuerpos y a formación de moléculas⁴, razones poderosas para el bajo interés experimental por estas especies. Sin embargo este tipo de sistemas poseen interés teórico porque necesitan de mejores aproximaciones que la interacción de contacto (2.9) para ser modelizados. Así son posibles, por un lado, modelos no-locales que tienen en cuenta potenciales de interacción más realistas, y por otro lado existen aproximaciones locales que tienen en cuenta más características de la interacción, como son su alcance y su anisotropía [42].

En la Tabla 2.1 se muestran los valores de los parámetros —longitud de scattering y confinamiento— que describen los experimentos más relevantes en este campo.

La búsqueda de los autoestados de hamiltoniano cuántico (2.5), o el estudio de la evolución temporal del operador bosónico

$$\partial_t \Psi = [H, \Psi] \quad (2.10)$$

⁴ Recordemos que a estas temperaturas el estado natural de los átomos alcalinos de sodio y rubidio es un sólido metálico, y el del hidrógeno son moléculas. En el primer caso la baja densidad del gas limita las colisiones y evita la solidificación del metal, en el segundo caso alineando los espines de los átomos de hidrógeno se evita la formación de moléculas.

átomo	a (m)	$\omega/2\pi$ (Hz)	$a_{x,y,z}$ (nm)	N	Ref.
^1H	7.2×10^{-11}	$\omega_{\perp} = 3.90 \times 10^3$, $\omega_z = 10.2$	$a_{\perp} = 1.61$ $a_z = 31.5$	2×10^{10}	[39]
^7Li	-1.44×10^{-9}	$\omega_x = 150.6$, $\omega_y = 152.6$, $\omega_z = 131.5$	$a_x = 3.10$ $a_y = 3.08$ $a_z = 3.31$	1×10^5	[12]
^{135}Cs	4.9×10^{-9}	(?)	(?)	(?)	[74]
^{23}Na	2.75×10^{-9}	$\omega_x = 745$ $\omega_y = 235$ $\omega_z = 410$	$a_x = 0.768$ $a_y = 1.37$ $a_z = 1.04$	7×10^5	[30]
^{87}Rb	5.77×10^{-9}	$\omega_{\perp} = 16.62$ $\omega_z = 47$	$a_{\perp} = 2.64$ $a_x = 1.57$	10^7	[57]
^{87}Rb	5.77×10^{-9}	$\omega_{\perp} = 219$ $\omega_z = 11.7$	$a_{\perp} = 0.728$ $a_x = 3.15$	10^5	[81, 22]

Tab. 2.1: Longitudes de scattering, a , confinamiento magnético, ω_i , y número máximo de bosones, N , de diversos experimentos con condensados de Bose–Einstein.

son tareas difícilmente abordables con un número de átomos realista. Sin embargo a temperaturas extremadamente bajas, del orden de 100nK, nos encontramos con que la probabilidad de ocupación del estado fundamental es tan elevada que podemos aproximar el operador bosónico por una función de onda compleja, $\psi(\mathbf{r}, t)$, despreciando los términos restantes que describirán excitaciones alrededor del estado base, $\phi(\mathbf{r}, t)$,

$$H = \int \bar{\psi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) + \frac{U_0}{2} |\psi|^2 \right] \psi d^n x \quad (2.11)$$

$$+ \int \bar{\Phi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) + U_0 |\psi|^2 \right] \psi d^n x + c.c. \\ + \mathcal{O}(N^{-1/2}). \quad (2.12)$$

En potenciales independientes del tiempo e imponiendo que los términos despreciados sean ortogonales al estado condensado, la máxima precisión del desarrollo se alcanza cuando $\psi(\mathbf{r}, t)$ es solución de la ecuación de Ginzburg–Gross–Pitaevskii estacionaria [104, 54]

$$\mu \psi(\mathbf{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) + U_0 |\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}). \quad (2.13)$$

En general es posible realizar una aproximación similar [20, 19] para estudiar la evolución temporal de un condensado, obteniéndose entonces la ecuación de Gross–Pitaevskii

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) + U_0 |\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.14)$$

Todos estos desarrollos se basan en despreciar la fracción no condensada del gas. Uno podría cuestionar hasta qué punto esta aproximación está justificada. La respuesta a esta pregunta es que la mayoría de los experimentos actuales se desarrollan a temperaturas muy por debajo de la necesaria para la condensación, en regímenes donde el fluido “normal” constituye una fracción muy pequeña del gas. Es tan pequeña ($\ll 1\%$) que la nube no condensada apenas puede detectarse por medios habituales y uno debe estimar su presencia de forma indirecta, estudiando la nube condensada, modos normales, atenuaciones, etc. Y tan pequeña de hecho que juega un papel marginal en la dinámica del condensado, de forma que la ecuación de Gross–Pitaevskii ha servido para describir de forma precisa casi todos los experimentos realizados a temperaturas por debajo de $0.5T_{CBE}$, donde T_{CBE} es la temperatura de transición de fase de gas normal a condensado. Por ejemplo, mediante la ecuación (2.14) se han estudiado los modos normales de oscilación de la nube condensada [121, 98, 97], la nucleación de vórtices [66] y la estabilidad de sistemas multicomponente [47], entre otros fenómenos.

En lo sucesivo nos olvidaremos del origen microscópico de la ecuación de Gross–Pitaevskii, tomándola como punto de partida con unas leves modificaciones. La principal consiste en un cambio de unidades. En la ecuación (2.14) aparecen muchas constantes físicas, pero sólo unos pocos parámetros independientes. Resulta habitual adimensionalizar la ecuación tomando como base una frecuencia de la trampa, $\omega_\perp$, la masa de los bosones, m , y la longitud característica del oscilador armónico, $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$. Realizando el cambio

$$\begin{aligned}\mathbf{x} &\rightarrow a_\perp \mathbf{x}, \\ t &\rightarrow t/\omega_\perp,\end{aligned}$$

la nueva ecuación queda en la forma

$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + U|\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.15)$$

con el potencial renormalizado

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [(1 - \varepsilon)x^2 + (1 + \varepsilon)y^2 + \gamma z^2], \quad (2.16)$$

y un término no lineal proporcional a $U = U_0 N = 4N\pi a/a_0$.

Estas unidades resaltan el carácter altamente no lineal de (2.14) en las aplicaciones prácticas. Recordando los valores de la Tabla 2.1 encontramos que la constante U alcanza valores tan altos como $U = 10000$. Este es el motivo de que en muchas ocasiones podamos despreciar el término cinético $-\frac{1}{2}\Delta$, efectuando la que se conoce como aproximación de Thomas–Fermi

$$\mu\psi = \{V(\mathbf{x}) + U|\psi|^2\} \psi. \quad (2.17)$$

Imponiendo la normalización apropiada, $\int |\psi| = 1$, obtenemos una única solución para la ecuación de Thomas–Fermi (2.17)

$$\psi \propto \sqrt{\mu - V(\mathbf{x})}, \quad (2.18)$$

válida dentro del elipsoide donde el radicando es positivo.

2.2.3 Formulación de Lagrange

No es difícil demostrar que cada solución de la ecuación (2.14) es un punto crítico de una integral de acción

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{L}(\mathbf{x}, t) d^3r dt = \int_{t_i}^{t_f} L(t) dt, \quad (2.19)$$

donde la densidad lagrangiana viene dada, salvo una divergencia, por la expresión siguiente

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{x}, t) &= \frac{i\hbar}{2} \left(\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} - \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V(\mathbf{x}, t) |\psi|^2 + U_0 |\psi|^4. \end{aligned} \quad (2.20)$$

En otras palabras, la ecuación de Gross–Pitaevskii surge del problema variacional

$$\frac{\partial S}{\partial \psi}(\psi) = 0, \text{ con } \psi(\mathbf{x}, t_i) = \phi_i(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x}, t_f) = \phi_f(\mathbf{x}). \quad (2.21)$$

La utilidad de esta formulación es múltiple. Primero, descubriendo las simetrías de la acción (2.19) es posible obtener las cantidades conservadas de la ecuación. En segundo lugar, hay ocasiones en las que un método numérico basado en un principio variacional es preferible a la obtención directa de soluciones de la ecuación en derivadas parciales (2.15) (Ver Capítulo 10). Finalmente, el principio variacional permite la obtención de estimaciones analíticas de la función de ondas y de sus propiedades macroscópicas (Sección 8.1).

En relación con las cantidades conservadas, nuestra ecuación tiene tres importantes. Estas son la energía

$$E[\psi] = \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V(\mathbf{x}, t) |\psi|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi|^4 \right\} d^n x, \quad (2.22)$$

la norma de la función de onda

$$N[\psi] = \|\psi\|_2^2 = \int |\psi(\mathbf{x})|^2 d^n x, \quad (2.23)$$

y el momento angular

$$\mathbf{L} = \hbar \int \bar{\psi} (\mathbf{x} \times \nabla) \psi d^n x. \quad (2.24)$$

La conservación de la norma surge de la invarianza de la ecuación bajo transformaciones de fase globales

$$\frac{d}{dt} N[\psi] = 0. \quad (2.25)$$

Para la conservación de la energía sólo es necesario que la acción sea invariante bajo traslaciones en el tiempo

$$\frac{d}{dt}E[\psi] = \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle_{\psi}, \quad (2.26)$$

y por último el momento angular permanece constante al ser proyectado sobre los ejes de simetría del potencial. Por ejemplo, cuando $\varepsilon = 0$ en la ecuación (2.8), tenemos que

$$\varepsilon = 0 \Rightarrow V(\mathbf{x}, t) = V(\sqrt{x^2 + y^2}, z, t) \Rightarrow \frac{d}{dt}L_z[\psi] = 0. \quad (2.27)$$

2.2.4 Estados estacionarios

Entre las múltiples configuraciones que puede adoptar el condensado, son de particular importancia aquellas en las que la distribución del gas permanece en “re-poso”. O más bien deberíamos decir que nos interesan *aquellos estados cuya distribución de densidad permanece constante*. Tales estados se conocen como ondas solitarias, ondas estacionarias o “estados estacionarios”. Esta es la denominación con la que nos quedaremos: un estado estacionario posee su dependencia temporal factorizada en la forma de una fase global que crece linealmente en el tiempo

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x})e^{-i\mu t}. \quad (2.28)$$

La constante μ suele recibir la denominación de frecuencia, pero es también el autovalor no-lineal de la ecuación que satisface el estado estacionario

$$\mu\phi(\mathbf{x}) = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + U|\psi|^2 \right\} \psi(\mathbf{x}). \quad (2.29)$$

Finalmente, es posible trabajar con la ecuación (2.21) para construir un principio variacional específico para estados estacionario, principio que encontraremos en al menos dos formulaciones bien conocidas. La primera dice que *un estado estacionario es un punto crítico de la energía sobre una superficie de norma constante*

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \psi} \right|_N [\phi] = 0. \quad (2.30)$$

La segunda formulación equivalente afirma que *un estado estacionario es un punto crítico del funcional de energía libre, $F[\psi]$,*

$$\frac{\partial F}{\partial \psi}[\phi] = 0, \quad (2.31)$$

donde la densidad de energía libre viene dada por la siguiente expresión

$$F[\psi] = E[\psi] - \mu N[\psi]. \quad (2.32)$$

Así pues, encontramos una última interpretación del autovalor μ , como multiplicador de Lagrange de la norma dentro del funcional de energía.

3. VÓRTICES EN CBE: TEORÍA Y RESULTADOS FUNDAMENTALES

Resumen

En este capítulo estudiamos una familia de defectos topológicos conocidos como vórtices. Partiendo de la definición de línea de vórtice establecida en el Capítulo 2, pasaremos a estudiar la estabilidad de vórtices multicargados en *condensados esféricos*, situación que corresponde a los primeros experimentos de generación de vórtices en condensados [87]. Para el estudio de la estabilidad desarrollaremos un algoritmo basado en la linealización de la ecuación de campo medio y en el estudio de los autovalores de este desarrollo [44]. Introduciremos las distintas nociones de estabilidad y demostraremos que un vórtice de carga unidad es dinámicamente estable aunque no energéticamente estable, mientras que un vórtice multicargado es linealmente inestable y puede dividirse sin coste energético en una red de vórtices con carga unidad.

3.1 Soluciones con vorticidad en trampas esféricas

3.1.1 Estados vórtice simétricos

Vamos a considerar el caso más sencillo con interés práctico, consistente en trampas con simetría axial ($\varepsilon = 0$ en el potencial (2.8)) y soluciones también con simetría axial, formadas por un vórtice de carga arbitraria situado sobre el eje de rotación del condensado. Como posible medio de estabilización del vórtice únicamente tendremos en cuenta la rotación del potencial confinante.

Para simplificar el tratamiento y enfatizar la simetría axial, plantearemos las sobre el sistema de referencia que gira con el potencial confinante (Ver §6.1) y sobre éste utilizaremos coordenadas cilíndricas

$$\begin{aligned} r_1 &= r \cos(\theta), \\ r_2 &= r \sin(\theta), \\ r_3 &= z. \end{aligned}$$

Sobre estas coordenadas podemos reescribir la ecuación de campo medio para el condensado (6.7)

$$i\partial_t\phi = \left[-\frac{1}{2}\Delta_r + V_0(\mathbf{r}) + U_0|\phi|^2 - \Omega L_z \right] \phi,$$

y encontrar expresiones particulares del funcional de energía

$$E[\psi, \Omega] = \int \left\{ \frac{1}{2} |\nabla\psi|^2 + V_0(\mathbf{r})|\psi|^2 + \frac{U_0}{2} |\psi|^4 - \Omega \bar{\psi} L_z \psi \right\} d^n\mathbf{r}, \quad (3.1)$$

y del funcional de energía libre

$$F[\psi, \Omega] = E[\psi, \Omega] - \mu N[\psi]. \quad (3.2)$$

Buscamos soluciones estacionarias

$$\partial_t \psi(r, z, \theta, t) = \mu \psi(r, z, \theta, t),$$

con simetría axial, que sean autoestados del operador momento angular

$$L_z \psi(r, z, \theta, t) = i \hbar \partial_\theta \psi(r, z, \theta, t) = m \psi(r, z, \theta, t), \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Estas soluciones poseen la dependencias angular y temporal factorizadas en forma de una fase proporcional al ángulo azimutal

$$\psi(r, z, \theta, t) = e^{-i\mu t} e^{im\theta} \phi^{(m)}(r, z),$$

y satisfacen una versión de la ecuación de Gross–Pitaevskii modificada para tener en cuenta las simetrías

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{m}{2r^2} - m\Omega + \frac{1}{2}(r^2 + \gamma z^2) + U_0 |\phi_\mu^{(m)}|^2 - \mu \right] \phi_\mu^{(m)} = 0, \quad (3.3)$$

con la normalización habitual

$$\int_{\mathbb{R}} \int_0^\infty |\phi^{(m)}(r, z)|^2 2\pi r \, dr \, dz = N.$$

El tratamiento que haremos de estas ecuaciones será puramente tridimensional, sin introducir condiciones de contorno espúreas (p. ej. periodicidad [65]). Nos interesará encontrar los estados de menor energía para cada valor de la vorticidad, m , así como la dependencia del espectro de energías respecto de la interacción, $U = NU_0$, y de la velocidad angular, Ω , los dos únicos parámetros libres para una geometría dada.

3.1.2 Búsqueda numérica de estados estacionarios

Debido al carácter no lineal del problema que pretendemos resolver (3.3) no son muchas las herramientas disponibles para abordarlo. La alternativa más utilizada y más fácil consiste en discretizar espacialmente la solución y plantear un proceso de minimización conocido como evolución en tiempo imaginario (Véase §10.4.2). La precisión de la solución dependerá en gran medida del tipo de discretización empleada —diferencias finitas [28, 99] o métodos espectrales [34]—; sin embargo, debido a (i) que estos métodos sólo proporcionan soluciones que son mínimos de la energía, (ii) problemas en la convergencia de la evolución en tiempo imaginario cuando $\Omega \neq 0$, y (iii) la complejidad computacional de los métodos, hasta el momento sólo se habían alcanzado valores relativamente pequeños del coeficiente de interacción, $U = 10^3$, alejados de los parámetros experimentales que se reflejan en la Tabla 2.1.

Buscando una solución a estos problemas, hemos desarrollado una nueva técnica de aproximación para estos problemas. Desde el punto de vista matemático el

método consiste en una aproximación de Galerkin en la se expande la incógnita utilizando una base ortonormal con vorticidad predeterminada, m . La base la forman autoestados del oscilador armónico lineal que resulta de hacer $U_0 = 0$ en la ecuación de Gross–Pitaevskii (3.3). En general tomaremos una cantidad suficiente de modos que contengan al menos el 90% de la energía

$$\psi_\mu^{(m)}(\vec{x}, t) \simeq e^{-i\mu t} e^{im\theta} \sum_n c_n P_n^{(m)}(r, z). \quad (3.4)$$

El índice abstracto n denota una pareja de números cuánticos, (n_z, n_r) que describen los grados de libertad axial y radial del oscilador, y $P_n^{(m)}$ se obtiene multiplicando un polinomio de Hermite en la variable z , un polinomio de Laguerre en la variable r y una gaussiana dependiente de ambas variables. Tras aplicar el cambio de escala $\rho = r \times \gamma$ las distribuciones de densidad de cada solución quedan en la siguiente forma

$$P_n^{(m)} = C_n H_{n_z}(z) L_{n_r}(\rho^2) r^m e^{im\theta} e^{-(\rho^2+z^2)/2}, \quad (3.5a)$$

$$C = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\gamma}\sqrt{\pi}2^{n_z}n_z!}} \sqrt{\frac{n_r!}{\pi(n_r+m)!}}. \quad (3.5b)$$

Introducimos el desarrollo (3.4) en la ecuación estacionaria (3.3) obteniendo así una ecuación no lineal para los coeficientes de la aproximación espectral

$$(E_i^{(m)} - \Omega m - \mu) c_i + U \sum_{jkl} A_{ijkl}^{(m)} \bar{c}_j c_k c_l = 0. \quad (3.6)$$

Mientras que $E_i^{(m)}$ denota simplemente la energía del autoestado $P_i^{(m)}$ en el oscilador armónico lineal, las cantidades $A_{ijkl}^{(m)}$ forman un tensor denso que surge de integrar cuatro modos sobre todo el espacio

$$A_{ijkl}^{(m)} = 2\pi \int \bar{P}_i^{(m)} \bar{P}_j^{(m)} P_k^{(m)} P_l^{(m)} dr dz. \quad (3.7)$$

En principio, dado que conocemos las forma de las funciones $P_i^{(m)}$, podríamos calcular de forma exacta estas integrales, apoyándonos por ejemplo en algún programa de cálculo simbólico. En la práctica este método resulta inviable debido a la aparición de cocientes, sumas y diferencias con grandes números (típicamente factoriales $n!$ del orden de los polinomios involucrados). Una segunda propuesta, teóricamente exacta, la encontramos en [34, 32] y consiste en utilizar fórmulas de cuadratura gaussiana. Dichas fórmulas convierten la integral (3.7) en una suma finita

$$A_{ijkl}^{(m)} = \sum_{q=1 \dots l+j+k+l} \omega_q (\bar{P}_i^{(m)} \bar{P}_j^{(m)} P_k^{(m)} P_l^{(m)})(r_q, z_q),$$

de al menos $2N + 1$ términos, donde N es el grado total del polinomio que aparece en el integrando. Este método se ha aplicado con éxito en [32] para buscar soluciones con hasta 36 modos. Sin embargo cuando uno desea alcanzar parámetros de

interacción elevados, el número de modos involucrados se dispara¹ y la búsqueda de puntos de cuadratura se convierte en una tarea difícil y computacionalmente más inestable que aplicar otros métodos más sencillos como la regla de Simpson de orden 4 [120].

Una vez fijamos todas las constantes, $E_i^{(m)}$, $A_{ijkl}^{(m)}$, μ y una estimación inicial para los coeficientes, c_n , podemos resolver la ecuación discreta (3.6) por medio del método de Newton para sistemas de ecuaciones algebraicas [120]. Sin embargo, antes de proceder a la obtención de las soluciones resulta aconsejable realizar dos simplificaciones que conducen a un menor coste computacional. La primera simplificación consiste en darse cuenta de que podemos imponer que la solución de mínima energía sea real y trabajar por tanto con coeficientes reales, $c_n \in \mathbb{R}$. La segunda simplificación consiste en imponer que esa solución tenga paridad positiva² respecto del plano XY: esto es, $\phi(r, -z) = \phi(r, z)$. De esta forma eliminamos modos redundantes de la expansión, ahorrando en memoria y alcanzando valores más altos de la autointeracción que de otra forma serían difíciles de estudiar.

Otra optimización importante consiste en descomponer el tensor (3.7) como producto de otros dos más pequeños que se obtienen integrando productos de H_n y L_n respectivamente [34]. Para ello basta con recordar que los índices $\{i, j, k, l\}$ del tensor son en realidad índices compuestos $\{(i_r, i_z) \dots\}$ y que las funciones $P_l^{(m)}$ se forman a partir del producto de polinomios sobre variables independientes. De esta forma

$$A_{ijkl} = A_{i_r j_r k_r l_r}^z A_{i_z j_z k_z l_z}^z$$

donde

$$\begin{aligned} A_{i_z j_z k_z l_z}^z &\propto \int H_{i_z} H_{j_z} H_{k_z} H_{l_z} dz, \\ A_{i_r j_r k_r l_r}^r &\propto \int P_{i_r}^{(m)} P_{j_r}^{(m)} P_{k_r}^{(m)} P_{l_r}^{(m)} 2\pi r dr. \end{aligned}$$

Esta descomposición resulta esencial al trabajar con un número grande de modos, tanto por el menor coste computacional en el cálculo de las integrales, como por el ahorro de memoria que significa almacenar los tensores pequeños y no el grande. Como ejemplo, al trabajar con 40 modos radiales $n_r = 0 \dots 40$ y 40 modos axiales $n_z = 0 \dots 39$, el tensor $A_{ijkl}^{(m)}$ alcanza la friolera de 6, 553.600, 000.000 elementos, cantidad que rebasa con mucho los límites de cualquier estación de trabajo potente, mientras que cada uno de los tensores pequeños contiene únicamente 2.560.000 números reales.

Por último debemos resaltar que en todas las etapas del trabajo nos encontramos con el requisito de evaluar polinomios de grados relativamente altos, muy oscilantes. Esta es una tarea complicada, que involucra sumas de términos con

¹ En este trabajo hemos necesitado del orden de 1600 modos para los resultados más precisos.

² Los estados de paridad positiva tienen menos ceros que los estados de paridad negativa y por tanto es de esperar que el estado fundamental posea esta simetría.

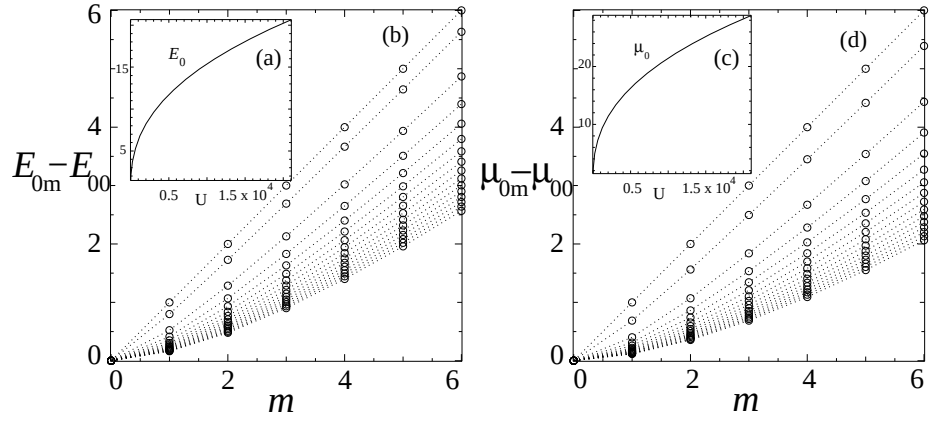


Fig. 3.1: Las gráficas (a) y (c) muestran la energía del estado fundamental E_{00} , y el potencial químico, μ_{00} , en función de la intensidad de la interacción. Las gráficas (b) y (d) muestran la evolución del potencial químico para distintos coeficientes de interacción y distintas vorticidades. El valor del parámetro U oscila entre $U = 0$ (curva superior) y $U = 50000$ (curva inferior). Los cálculos se han realizado en una trampa con simetría esférica, $\gamma = 1$, y las cantidades han sido adimensionalizadas.

signos alternantes y donde las cancelaciones dan lugar a inestabilidades numéricas. Una respuesta habitual a este problema suele ser el método de Horner [120], comparable a las técnicas rápidas para la transformada de Fourier, sin embargo en este problema incluso el método de Horner proporciona valores imprecisos en las regiones más críticas del espacio. La única solución viable que hemos encontrado son las fórmulas de recurrencia que definen los polinomios de Hermite

$$H_0(x) = 1, \quad (3.8a)$$

$$H_1(x) = 2x, \quad (3.8b)$$

$$H_n(x) = 2xH_{n-1} - 2(n-1)H_{n-2}, \quad (3.8c)$$

y los polinomios de Laguerre

$$P_0^m = 1, \quad (3.9a)$$

$$P_1^m = 1 + |m| - x, \quad (3.9b)$$

$$P_n^m = \frac{2n + |m| - 1 - x}{n} P_{n-1}^m - \frac{n + |m| - 1}{n} P_{n-2}^m, \quad (3.9c)$$

$$P_{n+1}^m = \frac{2n + |m| + 1 - x}{n+1} P_n^m - \frac{n + |m|}{n+1} P_{n-1}^m. \quad (3.9d)$$

Empleando estas fórmulas es posible evaluar establemente los polinomios y encontrar algoritmos iterativos para el cálculo exacto de las integrales (3.7).

3.1.3 Resultados en trampas estacionarias

Utilizando las técnicas anteriormente descritas, hemos encontrados los estados de menor energía para cada rama del espectro con una vorticidad bien definida, $m = 0, \dots, 6$. Hemos repetido este trabajo con geometrías esféricamente simétricas, $\gamma = 1$, y con trampas de formas ligeramente alargadas, $\gamma = 0.25$, y achatadas, a la vez que variamos la intensidad de la interacción $U = Ng$ desde 0 hasta aproximadamente 50000 en el mejor de los casos.

Los resultados del estudio se resumen en la Figura 3.1 para trampas estacionarias, $\Omega = 0$. Resulta importante que, en ausencia de rotación, los estados de mayor energía parecen ajustarse a leyes sencillas, casi lineales

$$\mu_{0m}(N) \simeq \mu_{00}(N) + \omega_{\text{eff}}(N)m, \quad (3.10a)$$

$$E_{0m}(N) \simeq E_{00}(N) + \tilde{\omega}_{\text{eff}}(N)m. \quad (3.10b)$$

El primer sumando de esta ley es el potencial químico del estado fundamental con $m = 0$, que en el límite de Thomas–Fermi [26] sigue aproximadamente la ley $\mu \propto N^{2/5}$, como se comprueba en la Figura 3.1(c).

El segundo término es más importante para la evolución del condensado. Crece linealmente, como los niveles de energía de un oscilador armónico lineal con una frecuencia efectiva, $\omega_{\text{eff}}(N)$, que decrece con la interacción. La distribución aproximadamente equiespaciada de estos niveles es la causa de respuestas resonantes en un condensado sometido a perturbaciones paramétricas (Véase el Capítulo §9) y tiene importancia en el comportamiento del condensado a altas velocidades de rotación.

3.1.4 Resultados en trampas rotantes

Ahora queremos estudiar las soluciones estacionarias en presencia de rotación. Nada más sencillo: al trabajar con soluciones que son autoestados del operador momento angular, la rotación únicamente supone una contribución aditiva a la energía y al potencial químico. El desplazamiento depende de la vorticidad del estado en cuestión

$$E_{nm}(U, \Omega) = E_{nm}(U, 0) - m\Omega, \quad (3.11a)$$

$$\mu_{nm}(U, \Omega) = \mu_{nm}(U, 0) - m\Omega, \quad (3.11b)$$

y da lugar a una rica fenomenología que se resume en la Figura 3.2(a).

En primer lugar comprobamos que la elección de un sentido de giro para el potencial rompe la degeneración de las soluciones respecto del signo de la vorticidad, m : ahora el valor de Ω decide qué solución, $\phi^{(+m)}$ ó $\phi^{(-m)}$, posee más energía. La rotación también destruye la degeneración existente en trampas esféricas sobre la dirección concreta del vórtice: cuando $\gamma = 1$ y $\Omega = 0$ cualquier elección del eje z es energéticamente equivalente, razón por la que en los experimentos con trampas esféricas resulta particularmente difícil mantener el vórtice en reposo [56].

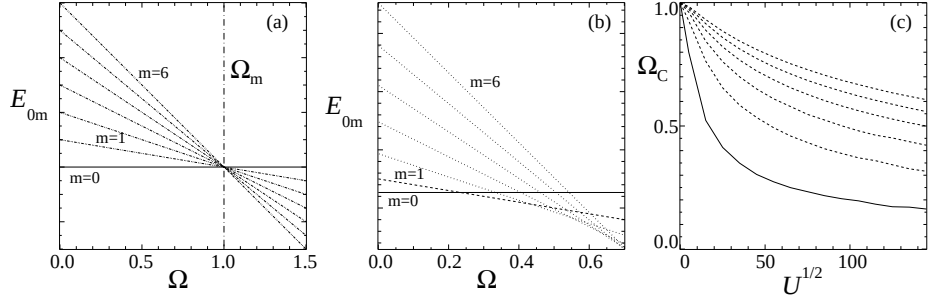


Fig. 3.2: Dependencia de los niveles de energía respecto de la velocidad angular, $E_{0m}(U, \Omega)$, para un valor fijo de la interacción (a) $U = 0$ y (b) $U \simeq 8000$, en un potencial esférico $\gamma = 1$. Representamos estados de vorticidad creciente, desde el $m = 0$ (continua), $m = 1$ (trazos) hasta el $m = 6$. (c) Velocidad de estabilización, Ω_m , de los estados vórtice en trampas esféricas en función de la interacción, U . Las líneas se disponen en orden de vorticidad creciente, desde Ω_1 (continua) hasta Ω_6 (línea superior a trazos).

En segundo lugar, por medio del desplazamiento introducido en (3.11) es posible en transformar los estados de una vorticidad dada en energéticamente más favorables que otros. Encontramos así intervalos de velocidades angulares (Ω_m, Ω_{m+1}) donde la solución $\phi^{(m)}$ posee menos energía que el resto de sus compañeras. Es habitual referirse a las cantidades Ω_m con el nombre de *velocidades críticas*, y vienen dadas por la diferencia de energía entre parejas de soluciones

$$\Omega_m = E_{0,m+1} - E_{0m}. \quad (3.12)$$

Sin embargo, aunque podemos hacer que uno de los estados de la familia $\{\phi^{(m)}\}$ tenga menos energía que los demás, no podemos asegurar en general que ese estado sea el estado fundamental, o tan siquiera un mínimo local. De hecho, mientras que en la sección §3.2.1 demostraremos que en trampas esféricas es posible convertir el vórtice $m = 1$ en un estado de mínima energía, en el Capítulo 4 demostraremos que en trampas muy alargadas esto resulta imposible.

En tercer lugar, aunque la separación energética entre los estados $\phi^{(0)}$ y $\phi^{(1)}$ se hace pequeña para grandes interacciones, la frecuencia de estabilización Ω_1 sólo se aproxima a cero asintóticamente para $U \rightarrow \infty$. En consecuencia queda demostrado numéricamente que el estado fundamental no puede tener vorticidad en ausencia de rotación. De hecho es posible una demostración sencilla de la misma afirmación sin más que comparar las energías de las soluciones $\psi_a = \phi$ y $\psi_b = |\phi|$ en el funcional (3.1):

$$E[\phi, \Omega = 0] = E[|\phi|, \Omega = 0] + \int |\phi|^2 (\nabla \arg \phi)^2 d^n x \geq E[|\phi|].$$

Finalmente encontramos un valor crítico de la velocidad a partir del cual se produce una inversión efectiva del espectro de energías. Este valor coincide con

la mínima frecuencia de confinamiento transversal del potencial armónico

$$\Omega_c = \omega_\perp (1 - \epsilon). \quad (3.13)$$

Por encima de Ω_c , la fuerza centrífuga debida a la rotación excede a la fuerza centrípeta debida a la trampa y el condensado escapa a su confinamiento, como se muestra en la Figura 3.2(a) para el caso lineal, $U = 0$.

En el caso no lineal el valor de la frecuencia crítica Ω_c teniendo el mismo, pero antes de llegar a esa velocidad conjeturamos la existencia de una segunda velocidad, Ω_{turb} , a partir de la cual la separación energética entre distintas vorticidades se vuelve muy pequeña. Entre Ω_{turb} y Ω_c el coste energético para la creación y destrucción de vórtices es virtualmente nulo, y esperamos la aparición de dinámicas turbulentas. La nueva velocidad crítica viene definida por el límite

$$\Omega_{turb}(U) = \lim_{m \rightarrow \infty} \Omega_m(U). \quad (3.14)$$

Empleando las ecuaciones (3.13) y (3.10) resulta fácil concluir que este límite coincide con la separación efectiva entre niveles de energía para valores grandes de la vorticidad y resulta siempre inferior al valor del problema lineal

$$\Omega_{turb} = \omega_{\text{eff}}(U) < \Omega_c.$$

3.2 Estabilidad de vórtices en trampas esféricas

3.2.1 Nociones de estabilidad

Hasta ahora hemos encontrado soluciones estacionarias para la teoría de campo medio del condensado de Bose–Einstein, todas con un valor bien definido de la tercera componente del operador momento angular, L_z . En los siguientes apartados estudiaremos la estabilidad de estas soluciones. Existen diversas acepciones matemáticas del concepto de estabilidad. Aquí nos concentraremos en tres particularmente útiles por su clara interpretación física.

Estabilidad energética: Decimos que un estado es energéticamente estable cuando constituye un mínimo del funcional de energía. Cuando se trata de un mínimo local hablamos de estabilidad energética local o metaestabilidad.

Estabilidad Lyapunov o dinámica: Una configuración es dinámicamente estable cuando bajo pequeñas perturbaciones el sistema permanece arbitrariamente próximo al estado inicial a lo largo de toda la evolución temporal. Matemáticamente podemos escribir algo del siguiente estilo

$$\|\psi(0) - \psi_{\text{pert}}(0)\| = \delta \Rightarrow \|\psi(t) - \psi_{\text{pert}}(t)\| = \epsilon(\delta) < +\infty, \forall \delta < \delta_{\text{max}}.$$

Estabilidad lineal: Se trata de la restricción del concepto de estabilidad dinámica a perturbaciones infinitesimales, $\delta \rightarrow 0$. Su utilidad radica en que la estabilidad lineal es condición necesaria para la estabilidad Lyapunov, proporcionando un criterio efectivo de *inestabilidad* que suele ser fácil de comprobar pues se limita al estudio de ecuaciones lineales.

Como apuntamos en el caso de la estabilidad lineal, existen relaciones entre estos criterios que podemos resumir en la siguiente cadena de implicaciones

$$\text{Energética} \Rightarrow \text{Lyapunov} \Rightarrow \text{Lineal}.$$

Cada definición tiene sus ventajas y sus inconvenientes. De las tres, la estabilidad Lyapunov es la que se acerca más a la noción de estabilidad como acotación de los cambios que puede sufrir el sistema. La estabilidad lineal es un concepto relativamente fácil de verificar y que sirve como condición necesaria para los otros tres criterios: si no hay estabilidad lineal no puede haber estabilidad dinámica. Por último el análisis de la energía es una herramienta bastante limitada, exclusiva de problemas conservativos y que en el campo de la CBE ha llevado a interpretaciones erróneas sobre la posibilidad de generar vórtices estables en condensados gaseosos [108].

3.2.2 Ecuaciones de estabilidad lineal

Comenzaremos nuestro estudio en la ecuación de Gross–Pitaevskii dependiente del tiempo (6.7). Separaremos la función de onda en suma de la solución estacionaria, ψ_0 , cuya estabilidad queremos caracterizar, y de una perturbación infinitesimal, $\epsilon\psi_1$,

$$\begin{aligned} \Psi(r, z, \theta, t) &= \psi_0 + \epsilon\psi_1 \\ &= [f(r, z)e^{im\theta} + \epsilon\alpha(r, z, \theta, t)] e^{-i\mu(\Omega)t}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Introduciendo esta expresión en la ecuación (6.7) y quedándonos con términos de orden $\mathcal{O}(\epsilon^1)$ obtenemos una pareja de ecuaciones lineales acopladas

$$i\partial_t \alpha = (H_0 + i\Omega\partial_\theta + 2Uf^2) \alpha + Uf^2 e^{-2im\theta} \bar{\alpha}, \quad (3.16a)$$

$$-i\partial_t \bar{\alpha} = (H_0 - i\Omega\partial_\theta + 2Uf^2) \bar{\alpha} + Uf^2 e^{2im\theta} \alpha, \quad (3.16b)$$

con el operador lineal del oscilador armónico, $H_0 = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}(\gamma^2 r^2 + z^2) - \mu(\Omega)$, y la representación del momento angular en espacio de posiciones $L_z = -i\partial_\theta$.

Aquí podemos optar por dos “recetas” equivalentes. Una consiste en separar la perturbación en parte real y parte imaginaria, $\alpha = a + ib$, y tratar las funciones a y b como independientes. La otra forma de proceder consiste en mantener la perturbación y su compleja conjugada, α y $\bar{\alpha}$, y trabajar con ambas como funciones independientes. Adoptando por sencillez esta última manera de proceder, reescribimos las ecuaciones linealizadas de forma compacta,

$$i\frac{\partial}{\partial t} \vec{W} = \sigma_z \mathcal{H}(\Omega) \vec{W} = \mathcal{B}(\Omega) \vec{W}, \quad (3.17)$$

empleando las siguientes definiciones

$$\vec{W} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \bar{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (3.18a)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.18b)$$

$$\mathcal{H}(\Omega) = H_0 + \begin{pmatrix} i\Omega\partial_\theta + 2Uf^2 & Uf^2 e^{-2im\theta} \\ Uf^2 e^{2im\theta} & -i\Omega\partial_\theta + 2Uf^2 \end{pmatrix}. \quad (3.18c)$$

3.2.3 Caracterización de los puntos críticos

Para determinar la estabilidad lineal de un estado estacionario necesitamos caracterizar la dinámica involucrada en la ecuación (3.17). La forma más conveniente de conseguirlo consiste en buscar una base apropiada donde la ecuación (3.17) sea diagonal. En otras palabras, buscamos autoestados, $\vec{W}_k^t = (u_k(r), v_k(r))$, que cumplan

$$\lambda_k \vec{W}_k = \mathcal{B} \vec{W}_k. \quad (3.19)$$

Si el operador $\mathcal{B}$ posee esta forma de Jordán y todos los autovalores son reales, entonces una perturbación arbitraria se puede descomponer en suma de modos

$$\vec{W} = \sum c_k e^{i\lambda_k t} \vec{W}_k, \quad (3.20a)$$

$$\alpha(\vec{r}, t) = \sum c_k e^{i\lambda_k t} u_k(\vec{r}, t), \quad (3.20b)$$

todos ellos acotados. Si el operador $\mathcal{B}$ carece de esta diagonalización, o si encontramos autovalores complejos al resolver (3.19), entonces tendremos modos que crecerán polinómicamente o exponencialmente en el tiempo, y el estado ϕ_0 resultará lineal, dinámica y energéticamente inestable.

Debemos resaltar que la diagonalización (3.19) está íntimamente relacionada con otras propiedades del estado perturbado, en particular con la energía. Asociada a la ecuación (3.17) encontramos un funcional de energía

$$E_2(\alpha) = \int 2\bar{\alpha} H_0 \alpha + U_0 \left(\psi_0^2 \bar{\alpha}^2 + \bar{\psi}_0^2 \alpha^2 + 4|\psi_0|^2 \alpha \bar{\alpha} \right), \quad (3.21)$$

y un funcional de energía libre con un multiplicador de Lagrange para la norma de la perturbación

$$F_2(\alpha) = E_2(\alpha) - \mu \int |\alpha|^2. \quad (3.22)$$

Ambos constituyen los términos de orden $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ en el desarrollo de (3.1) y (3.2) alrededor del estado sin perturbar. La diagonalización del operador $\mathcal{B}(\Omega)$ implica que podamos escribir el funcional de energía libre como forma bilineal

$$F_2(\alpha) = \sum |c_k|^2 \lambda_k G(\vec{W}_k), \quad (3.23a)$$

$$G(\vec{W}_k) = \int |u_k|^2 - |v_k|^2 = \pm 1. \quad (3.23b)$$

λ	Estabilidad lineal	Estabilidad global
Caja no diagonal	Inestable	Inestabilidad Lyapunov
Autovalor complejo	Inestable	—
$\exists \lambda G(\vec{W}) < 0$	Estable	Energéticamente inestable
$\lambda G(\vec{W}) > 0, \forall \lambda$	Estable	Energéticamente estable

Tab. 3.1: Relación entre la diagonalización de las ecuaciones linealizadas y la estabilidad global y lineal del estado.

Cuando todos los autovalores de la diagonalización (3.19) son números reales positivos, el estado estacionario ψ_0 resulta ser un mínimo del funcional de energía libre, y por tanto es *energéticamente y dinámicamente estable*. Cuando no se da esta condición, aun podemos encontrar modos neutros, $\lambda G = 0$, a lo largo de los cuales la energía permanece constante, y modos negativos, $\lambda G < 0$, que indican direcciones de energía decreciente.

Al estudiar el condensado como agregado de muchas partículas empleando la Teoría Cuántica de Campos, podemos intentar un procedimiento de linealización similar al (3.4) que se conoce como teoría de Bogoliubov [34]. En este contexto, $\bar{\alpha}$ y α son operadores lineales en el espacio de Fock de los bosones y buscamos un desarrollo de estos operadores que diagonalice el funcional de energía libre (3.21) y las ecuaciones de evolución. Al final las ecuaciones y los resultados son formalmente equivalentes y los resultados de estabilidad de la ecuación en derivadas parciales (6.7) son trasladables a la teoría basada en operadores.

3.2.4 Algoritmo numérico para el estudio de la estabilidad lineal

Para discriminar si un estado estacionario cualquiera, $\phi^{(m)}$, es linealmente estable, debemos decidir si las ecuaciones de evolución linealizadas,

$$i \frac{\partial \vec{W}}{\partial t} = \mathcal{B} \vec{W},$$

poseen soluciones no acotadas. Para ello diagonalizaremos el operador $\mathcal{B}$ en un subespacio finito-dimensional apropiado y clasificaremos las cajas y autovalores resultantes de la diagonalización de acuerdo con la Tabla 3.1, determinando si el vórtice es estable. En caso de inestabilidad es interesante comprobar si ésta se suprime para algún valor de la velocidad angular, Ω . Por último debemos comprobar que el tamaño del espacio finito-dimensional elegido no influye en los resultados y contrastar el análisis de estabilidad lineal con simulaciones numéricas de la evolución de distintos estados perturbados.

Para realizar esta tarea es conveniente expandir las perturbaciones α y $\bar{\alpha}$ en

estados con vorticidad bien definida

$$\vec{W} = \sum_{i,n} c_{i,n} \vec{W}_i^{(n)} = \sum_{i,n} c_{i,n} \begin{pmatrix} u_i^{(n)}(r) e^{in\theta} \\ v_i^{(2m-n)}(r) e^{i(2m-n)\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Los operadores lineales definidos en (3.18) conmutan con el operador de momento angular $L_z = i\partial_\theta$ y por tanto mantienen invariantes los subespacios de vorticidad definida $\{\vec{W}_i^{(m)}\}_i$. Podemos trabajar con estos subespacios por separado, estudiando en cada uno la diagonalización de un operador diferente, $\mathcal{B}_n(\Omega)$,

$$\lambda_k^n \vec{W}_k^{(n)} = \mathcal{B}_n(\Omega) \vec{W}_k^{(n)}, \quad n \geq m. \quad (3.25)$$

definido por medio de las siguientes relaciones

$$\mathcal{B}_n(\Omega) = \sigma_z \mathcal{H}_n(\Omega), \quad (3.26a)$$

$$\mathcal{H}_n(\Omega) = \mathcal{H}_{0n}(\Omega) + \mathcal{U}_n, \quad (3.26b)$$

$$\mathcal{H}_{0n} = \begin{pmatrix} H^n - (n-m)\Omega & \\ & H^{2m-n} - (m-n)\Omega \end{pmatrix}, \quad (3.26c)$$

$$H^n = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}(\gamma^2 r^2 + z^2) + \frac{n^2}{2r} + f^2 - \mu(0) \quad (3.26d)$$

$$\mathcal{U}_n = Uf^2 \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.26e)$$

Es necesario insistir en la necesidad de estudiar tanto los autovalores como la función³ $G(\vec{W}_k^{(n)})$, pues es su producto el que aparece en el desarrollo de la energía libre (3.22). Existe una degeneración en las ecuaciones tal que los modos surgen en parejas

	$\vec{W}_k^{(n)}$	$\vec{W}_k^{(2m-n)}$
Funciones	$(u_k^{(n)}, v_k^{(2m-n)})$	$(v_k^{(2m-n)}, u_k^{(n)})$
Autovalor	λ_k	$-\lambda_k$
Medida, G	1	-1

Para evitar confusiones, en lo que sigue, únicamente nos fijaremos en el modo que cumple $G > 0$, donde u_k es la contribución dominante a la perturbación. Así, diremos que el modo $\vec{W}_k^{(n)}$, de vorticidad n , contribuye a la energía en la cantidad $\epsilon = G\lambda_k = \lambda_k$, que puede ser positiva, negativa o cero.

Para resolver la ecuación de autovalores (3.25) hemos discretizado ésta en la base que es producto cartesiano de la utilizada en §3.1.2 para la ecuación de Gross-Pitaevskii estacionaria. Utilizando la misma notación, los modos se expanden en

³ La función $G(\vec{W})$ surge de una forma bilineal $(\vec{W}_i, \vec{W}_k) = \int (\bar{u}_i \bar{u}_k - v_i v_k) d^n x$, que no es definida positiva, pero que juega un papel equivalente al de un producto escalar, definiendo una pseudo-ortogonalización entre los componentes de la base. En este sentido, $G(\vec{W})$, es equivalente a una pseudo-norma o medida del autovector.

la forma siguiente

$$\vec{W}_i^{(n)} = \sum_k a_k \begin{pmatrix} P_{kn} \\ 0 \end{pmatrix} + \sum_l b_l \begin{pmatrix} 0 \\ P_{l,2m-n} \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Sobre esta base el operador $\mathcal{H}_{0n}$ es diagonal, mientras que el operador $\mathcal{U}$ debe ser evaluado, bien en términos de integrales de la función de onda $\phi_0(\mathbf{r})$ consigo misma, o bien empleando un tensor equivalente al definido en la ecuación (3.7). En cualquier caso las ecuaciones resultantes son siempre lineales y la dificultad estriba en construir y diagonalizar una matriz bastante grande. De nuevo resulta conveniente aplicar simplificaciones operativas, que incluyen la naturaleza real del estado sin perturbar, $f(r, z)$, y la posibilidad estudiar las perturbaciones con paridad positiva y negativa por separado.

3.2.5 Resultados analíticos

A continuación presentamos algunas propiedades interesantes de los autovalores y autoestados de la ecuación (3.25) y las propiedades de estabilidad.

Teorema 1 (Coste energético de una inestabilidad exponencial).

Cualquier autovalor que satisfaga la ecuación (3.25) con una medida no nula $G(\vec{W}) \neq 0$ debe ser real. Los autovalores complejos involucran modos con medida $G(\vec{W}) = 0$ que desaparecen en la linealización de la energía (3.22).

Demostración. Este teorema se demuestra proyectando la ecuación (3.25) sobre el modo $\vec{W}_i^{(n)\dagger}$. Omitiendo los índices resulta una identidad

$$\begin{aligned} \lambda \int (|u|^2 - |v|^2) &= \int (\bar{u} H^n u + \bar{v} H^{2m-n} v) + \int U f^2 |u + v|^2 \\ &- \int (n - m) \Omega (|u|^2 + |v|^2), \end{aligned} \quad (3.28)$$

que involucra el autovalor λ y una serie de cantidades, todas ellas reales. De aquí se deduce que si $G(u, v) \neq 0$, entonces λ también debe ser real, mientras que si λ tiene parte imaginaria distinta de cero entonces $G(u, v) = 0$. $\square$

De acuerdo con este teorema, las inestabilidades exponenciales se caracterizan por ser perturbaciones con un coste cero en la energía libre. Desde el punto de vista matemático estos modos corresponden a una meseta en la energía, con cambios de orden $\mathcal{O}(\epsilon^3)$ y donde, por tanto, el procedimiento de linealización resulta insuficiente. Por ejemplo, si en lugar de estudiar la linealización de la ecuación de Gross–Pitaevskii (3.17) partimos de la formulación Lagrangiana §2.21 y desarrollamos a segundo orden, obtendremos la acción $\mathcal{S} = \int L(t) dt$ correspondiente a la densidad lagrangiana

$$L = \int \frac{i}{2} (\alpha \bar{\alpha}_t - \bar{\alpha} \alpha_t) d^n r + F_2(\alpha). \quad (3.29)$$

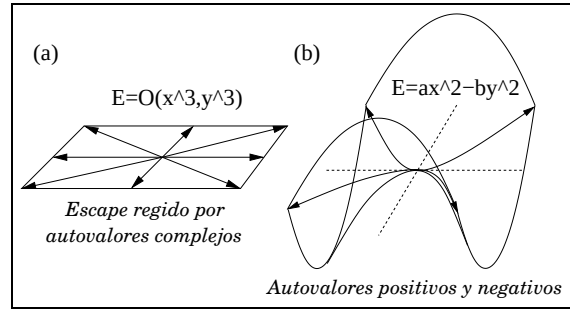


Fig. 3.3: (a) Los autovalores complejos representan “mesetas” donde la energía cambia tan poco que el estudio de las ecuaciones linealizadas no proporcionan información suficiente. (b) Cuando el análisis de estabilidad revela autovalores negativos, $\lambda G < 0$, es posible inducir perturbaciones que nos alejan del estado original sin coste energético alguno. Este mecanismo es responsable de la vida media de una configuración cuando tenemos en cuenta la interacción del condensado con su entorno y procesos disipativos.

Utilizando (3.23a) comprobamos que los modos con $G(\vec{W}) = 0$ desaparecen de la acción y parecería que no tienen influencia en la dinámica. Por tanto, aunque los autovalores complejos indican direcciones de posible inestabilidad, resulta imposible discriminar a priori cuando estas inestabilidades tienen “realidad física” y se manifiestan en la dinámica.

Teorema 2 (Condición suficiente de estabilidad).

Si el hamiltoniano linealizado $\mathcal{H}$ es definido positivo, entonces el operador $\mathcal{B}$ es diagonalizable, todos los autovalores son números reales positivos, y el estado estacionario ϕ_0 es energéticamente estable.

Demostración. La demostración de este teorema exige únicamente comprobar que, debido a la positividad del hamiltoniano, existe una correspondencia biunívoca entre los autoestados del operador $\mathcal{H}^{1/2}\sigma_z\mathcal{H}^{1/2}$ y las autofunciones del operador de Bogoliubov, $\sigma_z\mathcal{H}_n$. Esto es,

$$\mathcal{H}_n^{1/2}\sigma_z\mathcal{H}_n^{1/2}|n\rangle = \lambda|n\rangle, \quad (3.30)$$

sí y sólo si

$$\sigma_z\mathcal{H}_n\mathcal{H}_n^{(-1/2)}|n\rangle = \lambda\mathcal{H}_n^{(-1/2)}|n\rangle. \quad (3.31)$$

□

Teorema 3 (Simplificaciones esenciales en trampas estacionarias).

En la ecuación (3.25), si $\Omega = 0$ y $n > 3m$, el hamiltoniano linealizado $\mathcal{H}_n$ es positivo, el operador de Bogoliubov $\mathcal{B}_n$ puede ser diagonalizado y también es positivo. Además, si $n > m$, cualquier autovalor real de $\mathcal{B}_n$ cumple $\lambda G > 0$.

Demostración. La prueba consta de varios pasos y todos ellos se basan en las definiciones de los operadores linealizados (3.26). En primer lugar se comprueba que si $n > 3m$ entonces $H^{2m-n} \geq m > (m-n)\Omega$ y $H^n \geq 3m > (n-m)\Omega$. Utilizando este resultado y la positividad del operador $\mathcal{U}_n$ es inmediato demostrar la positividad del operador linealizado $\mathcal{H}_n > 0$ y deducir por tanto la ausencia de modos desestabilizantes. Cuando $n > m$, la ecuación (3.28) sirve para demostrar que los autovalores reales del operador $\mathcal{B}_n$ únicamente proporcionan contribuciones positivas a la energía. $\square$

Aplicando los dos teoremas anteriores al estudio del estado $\phi_m \propto e^{im\theta}$ nos encontramos con que cualquier modo con energía negativa debe poseer vorticidad $0 \leq n \leq m$, mientras que las inestabilidades dinámicas únicamente pueden encontrarse en los subespacios $0 < n < 3m$. Gracias a esta importante simplificación sólo necesitamos diagonalizar un número finito de operadores para analizar la estabilidad del estado estacionario. Debemos señalar que este resultado es una generalización del obtenido en [123], donde se demuestra que una condición suficiente de estabilidad es $n^2 \geq 4m^2$, sin tener en cuenta posibles autovalores complejos.

Teorema 4 (Estabilidad local bajo rotación).

El operador $\mathcal{B}_n(\Omega)$ depende linealmente respecto de la velocidad angular Ω

$$\mathcal{B}_n(\Omega) = \mathcal{B}_n(0) - (n - m)\Omega. \quad (3.32)$$

Así pues, los resultados de la diagonalización permanecen invariantes en presencia de rotación, salvo por un desplazamiento de los autovalores proporcional a la vorticidad

$$\lambda(\Omega) = \lambda(0) - (n - m)\Omega. \quad (3.33)$$

Este teorema constituye el núcleo de este capítulo pues plantea la posibilidad de utilizar la rotación para convertir determinadas configuraciones dinámicamente estables en mínimos locales del funcional de energía y por tanto en energéticamente estables. En general debemos comprobar la influencia de estos desplazamientos numéricamente. Es fácil comprobar, sin embargo, que el desplazamiento de los autovalores es positivo para $n < m$, de manera que en principio sería posible eliminar los autovalores negativos para una velocidad de rotación suficiente.

Este teorema presenta además un resultado muy importante: que debido a que el desplazamiento $-(n - m)\Omega$ es un número real, los autovalores complejos que encontremos en trampas estacionarias, siguen presentes cuando el potencial comience a girar, de manera que la presencia de inestabilidades dinámicas es independiente de la rotación.

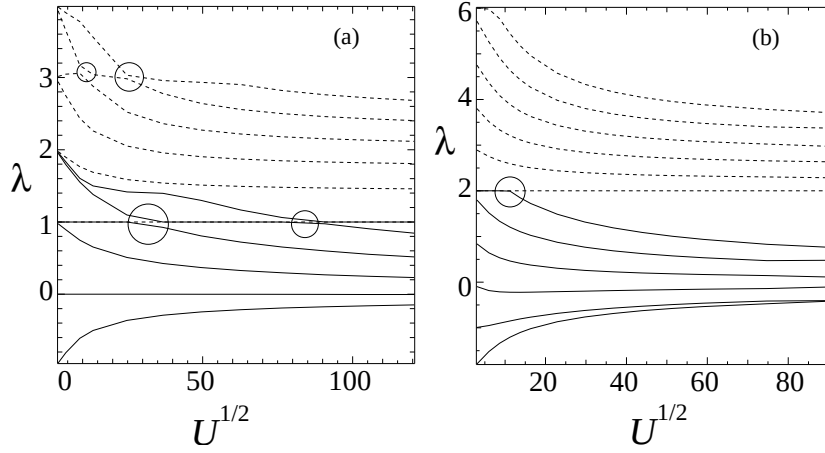


Fig. 3.4: Autovalores más bajos del operador B_0 para un vórtice centrado de carga unidad, $m = 1$ en (a) una trampa esféricamente simétrica, $\gamma = 1$, y (b) en una trampa prolata, $\gamma = 0.25$. Las líneas sólidas representan perturbaciones con vorticidad $n = 0$, mientras que las líneas a trazos pertenecen a perturbaciones con vorticidad $n = 2$. Los círculos marcan cruces de niveles que resultan difícil de discriminar numéricamente.

3.2.6 Estabilidad lineal de vórtices simétricos

Estabilidad del vórtice $m = 1$ en trampas estacionarias: Partiendo de las soluciones obtenidas en §3.1.3 hemos estudiado la diagonalización del operador, B_0 , el único necesario, en virtud del Teorema 3, para conocer si éste vórtice es estable. Este procedimiento se ha repetido para distintos valores de la interacción $U = U_0 N$, en ausencia de rotación, $\Omega = 0$, llegando a la conclusión de que el operador de Bogoliubov admite una forma diagonal con autovalores reales.

En la figura 3.4(a) mostramos un subconjunto de los autovalores del operador B_0 para una trampa simétrica. En la figura 3.5(a) mostramos los mínimos autovalores para éste y otros operadores, donde se comprueba la validez del Teorema 3. En primer lugar, resulta clara la existencia de dos autovalores constantes, $\lambda = 1$ que corresponden a oscilaciones del vórtice alrededor del eje Z. En segundo lugar, apreciamos dos modos neutros $\lambda = 0$ que corresponden a la arbitrariedad en la dirección del vórtice. Este autovalor y la degeneración que lo originan desaparecen en la trampa alargada, $\gamma = 0.25$, como se aprecia en la Figura 3.4. Por último encontramos un autovalor negativo en la trampa esférica y dos o más en la trampa alargada, correspondientes a perturbaciones que expulsan el vórtice fuera del condensado [108], y cuya forma se muestra en la figura 3.6.

La presencia de autovalores negativos indica además que, en trampas estacionarias el vórtice nunca puede ser un mínimo del funcional de energía. Este hecho puede cobrar importancia en el momento en que consideremos correcciones disi-

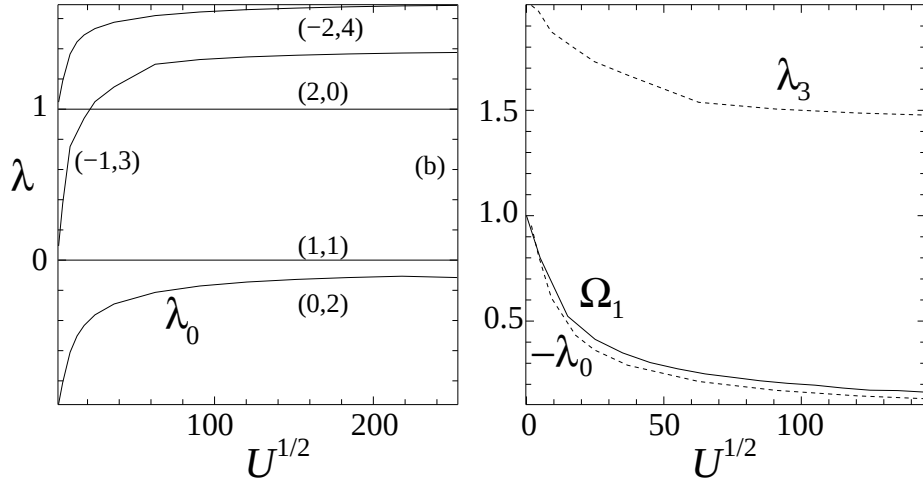


Fig. 3.5: (a) Energías de excitación más bajas para modos con distintas perturbaciones respecto del estado estacionario $\phi^{(1)}$ en un potencial con simetría esférica $\gamma = 1$. Las vorticidades de cada modo aparecen reflejadas junto a la curva correspondiente en forma de tuplas $(n, 2m - n)$. (b) Comparamos la velocidad crítica Ω_1 (línea continua), con los autovalores $-\lambda_0$ (línea de trazos) y λ_3 (línea superior) en una trampa esférica $\gamma = 1$.

pativas a la teoría de campo medio, pues la interacción con elementos externos (imperfecciones en la geometría de la trampa, átomos no condensados, colisiones inelásticas), el sistema será susceptible de tomar las direcciones de energía decreciente y abandonar la configuración del vórtice. Así pues, la existencia de autovalores negativos condiciona la estabilidad práctica de una solución estacionaria a la intensidad de los mecanismos disipativos⁴.

Debemos además resaltar que el número de modos energéticamente inestables ($\lambda G < 0$) se incrementa con la elongación de la trampa [Ver Figura 3.4]. Así, mientras en trampas esféricas y achatadas ($\gamma \geq 1$) sólo existe un autovalor negativo, en un potencial alargado las excitaciones longitudinales del condensado son relativamente “económicas” y es posible inducir modulaciones sobre la línea de vórtice con un coste nulo, como se esquematiza en la figura 3.3(b). De hecho, como demostraremos en el Capítulo 4, estos modos dan lugar a la existencia de vórtices deformados estables en trampas rotantes.

Estabilidad del vórtice $m = 1$ en trampas rotantes: En el Teorema 4 demostramos que la rotación desplaza los autovalores con vorticidades $n < m$ y $n > m$ hacia valores positivos y negativos, respectivamente. Resulta por tanto viable buscar un rango de velocidades angulares, $(\bar{\Omega}_1, \bar{\Omega}_1^c)$, en el cual todos los

⁴ Sin embargo, a fecha de hoy, ningún experimento ha revelado la existencia de mecanismos disipativos que actúen sobre los vórtices en tiempos más cortos que la vida media del condensado, esto es, unos pocos segundos.

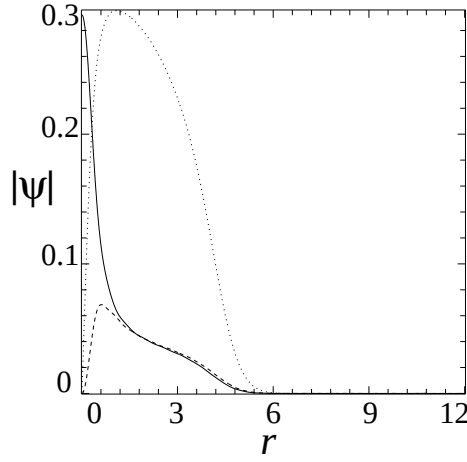


Fig. 3.6: Perfil de un modo con energía negativa, $\lambda G < 0$, a altura $z = 0$. Mostramos la solución sin perturbar (ϕ_1 , línea de puntos), la componente más importante del modo (u , línea continua) y la contribución más pequeña (v , línea de trazos) en función del radio, todas ellas reescaladas para facilitar la visualización. Resulta evidente que al sumar $\phi_1 + \epsilon u + \epsilon v e^{-2i\theta}$ el vórtice se ve desplazado hacia la periferia del condensado.

autovalores procedentes de la diagonalización (3.19) alrededor del estado ϕ_1 sean positivos. En este rango de velocidades el vórtice simétrico y centrado se convierte por tanto en un estado energética, dinámica y linealmente estable.

El intervalo de estabilización del vórtice lo calculamos a partir de los mínimos autovalores de cada operador de Bogoliubov. En el caso de un potencial esférico y trabajando con un único vórtice, este intervalo existe, es distinto de cero y viene dado por las velocidades angulares $\bar{\Omega}_1 = -\lambda_0$ y $\bar{\Omega}_1^c = \lambda_3$. Como muestra la figura 3.5(b) resulta además que la velocidad necesaria para estabilizar un vórtice es inferior a la necesaria para que éste vórtice tenga menos energía que el estado ϕ_0

$$\bar{\Omega}_1 < \Omega_1 \text{ para } \gamma = 1.$$

Existe por tanto un rango de velocidades ($\bar{\Omega}_1, \Omega_1$) en el cual el estado ϕ_1 se convierte en un mínimo local de la energía, pero el estado fundamental sigue careciendo de vorticidad.

Estabilidad del vórtice $m = 2$: Aparte de los estados ϕ_0 y ϕ_1 , también hemos estudiado configuraciones con vórtices multicargados, $\phi_2, \phi_3, \dots$. En este caso, por resultados conocidos de otros sistemas esperamos que el vórtice multicargado tenga más energía que una red de vórtices con carga unidad.

Esta predicción se ve confirmada por el análisis numérico. En primer lugar la diagonalización de los operadores $\mathcal{B}_1$ y $\mathcal{B}_0$ revela la existencia de un autovalor negativo, y de dos autovalores negativos y una pareja compleja, respectivamente.

Los autovalores negativos son demasiado grandes y crecen con la interacción, razón por la cual es imposible encontrar un intervalo de velocidades ($\bar{\Omega}_2, \bar{\Omega}_2^c$) en el que se supriman y el estado sea energéticamente estable. Además los autovalores complejos parecen indicar la presencia de inestabilidades dinámicas cuya naturaleza precisaremos más adelante.

Este resultado se puede generalizar a otras configuraciones de vórtices multicargados, de manera que llegamos a la siguiente conclusión: *para velocidades de rotación que cumplan*

$$\Omega_2 < \bar{\Omega}_1^c < \Omega < \Omega_c$$

el estado fundamental del condensado posee vorticidad, pero carece de simetría de rotación. Como comprobaremos en el Capítulo 4, en este régimen de velocidades el estado de mínima energía se forma a partir de una malla de vórtices de carga unidad. Sin embargo la búsqueda de estas configuraciones es tarea harto difícil (Ver §10.4 y siguientes).

3.2.7 Estabilidad dinámica

Como apuntamos en §3.2.1, una solución de la ecuación de Gross–Pitaevskii es estable Lyapunov cuando al perturbar ligeramente el dato inicial la nueva solución permanece “próxima” a la original.

Resulta muy difícil estudiar la estabilidad Lyapunov de una ecuación de ondas inhomogénea como la de Gross–Pitaevskii (6.7), o al menos hacerlo de forma rigurosa. Lo que hemos hecho es comprobar el criterio de estabilidad dinámica numéricamente, simulando la evolución de vórtices estacionarios ϕ_1 y ϕ_2 sometidos a perturbaciones construidas con diversas proporciones de los modos que consideramos fuentes de inestabilidad. Estas simulaciones se llevaron a cabo empleando un método “split–step” simetrizado [43] y donde evaluamos la acción de los operadores utilizando una base de Fourier con 80^3 modos, sobre una malla tridimensional uniforme de dimensiones apropiadas.

El resultado principal de este trabajo ha sido comprobar que tanto el vórtice de carga unidad y como el vórtice de carga $m = 2$ son dinámicamente estables. En el primer caso, al añadir una contribución pequeña (0.5% en norma) del modo $m = 0$ (Ver Figura 3.6), observamos que el vórtice precesa, pero se mantiene próximo al origen, lo cual es natural si tenemos en cuenta las leyes de conservación de la energía y del momento angular.

El segundo caso es bastante más espectacular: recordemos que para el vórtice multicargado encontramos autovalores complejos que sugerían inestabilidades lineales. Hemos perturbado estas soluciones con pequeñas contribuciones del modo desestabilizador, comprobando que este modo involucra una división de la línea de vórtice en el dato inicial, pero que ésta permanece prácticamente en la misma configuración, con ambos vórtices girando a igual velocidad alrededor del origen. Así pues, aunque existe una tendencia energética del vórtice multicargado a desintegrarse en dos líneas de vórtice, esta tendencia no se manifiesta en la dinámica del

sistema conservativo y sólo puede jugar algún papel cuando tengamos en cuenta elementos disipativos o perturbaciones externas.

3.3 Conclusiones

Hemos estudiado las soluciones con vorticidad de un condensado de Bose–Einstein en la aproximación de campo medio (6.7), en trampas axialmente simétricas tanto estacionarias como sometidas a rotación.

En primer lugar buscamos las soluciones de la ecuación (6.9) que poseen la mínima energía y son autovalores de la tercera componente del operador momento angular, $\psi^{(m)} = f(r, z)e^{im\theta}$, empleando desde coeficientes de interacción prácticamente nulos hasta valores realistas [Tabla 2.1]. Hemos encontrado que se requiere una velocidad angular distinta de cero para conseguir que el estado fundamental del condensado posea momento angular.

A continuación hemos estudiado la estabilidad de las soluciones estacionarias $\phi^{(m)}$. Hemos demostrado que el vórtice de carga unidad, $m = 1$, es energéticamente inestable y que esta inestabilidad puede ser suprimida mediante una velocidad de rotación lo bastante elevada. También hemos comprobado que esta inestabilidad energética no se manifiesta en la dinámica del sistema conservativo, de manera que pequeñas perturbaciones del vórtice conducen a oscilaciones acotadas del mismo alrededor del origen.

Por último hemos estudiado la estabilidad de vórtices simétricos con carga igual o superior a $m = 2$. En este apartado encontramos que un vórtice multicargado es siempre una solución energéticamente desfavorable y que, al contrario que ocurre con el vórtice unidad, no existe un rango de velocidades donde el estado fundamental sea un vórtice simétrico multicargado. Los distintos regímenes que podemos encontrar son, por tanto

Velocidades	Estado fundamental
$[0, \Omega_1)$	ϕ_0 , estado sin vorticidad
(Ω_1, Ω_2)	ϕ_1 , vórtice centrado
(Ω_2, Ω_c)	múltiples vórtices
$(\Omega_{turb}, \Omega_c)$	turbulencia
(Ω_c, ∞)	no existe estado fundamental

El análisis de estabilidad lineal también sugiere la presencia de inestabilidades dinámicas. Un estudio más detallado de la dinámica de soluciones perturbadas revela que los autovalores complejos obtenidos en el desarrollo lineal se deben al coste cero de la separación del vórtice multicargado. Así, en el marco de la teoría de campo medio, sin disipación y sometido a la ley de conservación del momento angular, el vórtice multicargado resulta estable. Todo lo más una perturbación externa puede dar lugar a la separación del vórtice multicargado en un conjunto de vórtices, pero estos permanecerán arbitrariamente próximos precesando alrededor del origen.

Estos resultados numéricos han sido posibles gracias a la utilización de un potente método espectral (§3.1.2) que ha sido optimizado para permitir la utilización de 1600 modos o más, lo que representa un paso hacia adelante respecto de trabajos anteriores.

4. VÓRTICES EN CBE: GENERACIÓN EN TRAMPAS ASIMÉTRICAS

Resumen

En este capítulo estudiaremos una familia de experimentos de reciente realización [81, 22] que persiguen la generación de vórtices en condensados de Bose–Einstein por medio de trampas rotantes muy deformadas. Combinando las herramientas del análisis de estabilidad lineal (Capítulo 3), con la optimización global del funcional de energía (Capítulo 10), estudiaremos los diferentes regímenes accesibles en estos experimentos. Los resultados fundamentales son, (i) la existencia de histéresis en el proceso de nucleación del vórtice debido a la metaestabilización del estado sin vorticidad [49], (ii) la deformación de las líneas de vórtice para acomodar de forma creciente y casi continua el momento angular [48].

4.1 Introducción

En los capítulos 3 y 6 hemos estudiado las líneas de vórtice y su importancia en el campo de la superfluidez, como medio del superfluido para adquirir momento angular y adaptarse a perturbaciones rotantes. En este capítulo estudiaremos el primer experimento que relaciona vorticidad y rotación en el contexto de la condensación de Bose–Einstein.

Hasta el momento existen dos familias de experimentos importantes en el campo de la generación de vórtices en condensados gaseosos. La primera en orden de antigüedad se remonta al año 1999 y tiene lugar en los laboratorios del JILA, en Colorado. Inspirados por las ideas de J. Williams y M. Holland [66] se plantean una serie de experiencias [87] en las que se diseña la distribución de fase de un condensado multicomponente para que albergue un vórtice. El problema con estos trabajos es que al realizarse el diseño de la fase por medios ópticos y no mecánicos, aportan muy poca información sobre la naturaleza superfluida del condensado, tal y como la definimos en §2.1.4.

La segunda familia de experimentos importantes tiene lugar en la École Normale Supérieure (ENS) [81, 22] y consiste en la manipulación de un condensado en una trampa que rota con velocidad y deformación ajustables. La idea es la misma que subyace a las experiencias con helio superfluido en cubos rotantes: generar vórtices por medios puramente “mecánicos”. Es en estos trabajos donde queda patente la relación entre vorticidad y rotación, y donde aparecen *aplicados* por primera vez conceptos como velocidad crítica, medida del momento angular y momento de inercia.

En los siguientes apartados estudiaremos los experimentos de la ENS desde un punto de vista teórico [49, 48], buscando explicación para los resultados más sorprendentes, entre los que se incluyen: (i) la existencia de una histéresis en la nucleación de vórtices que implica velocidades de rotación más grandes de la esperadas para estabilizar una línea de vórtice; (ii) la observación de vórtices no como cerros de la densidad, sino como agujeros parcialmente llenos; y (iii) el crecimiento casi continuo del momento angular a partir de la nucleación del primer vórtice, sin apreciarse cuantización alguna del mismo.

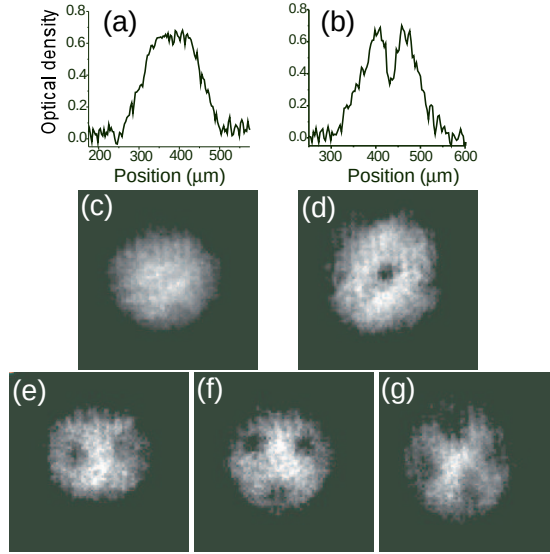


Fig. 4.1: (c-g) Vistas superiores de un condensado real con cero, uno y hasta cuatro vórtices, tal y como son vistos en el experimento de la ENS [81]. (a-b) Representaciones detalladas del grado de contraste de los vórtices.

Otros trabajos han contribuido a la descripción teórica de los experimentos de la ENS. En la referencia [124] se estudia analíticamente la dinámica de las líneas de vórtice, obteniéndose las energías de los modos de deformación de las mismas. En la referencia [35] se confirma numéricamente la existencia de estos modos. Y por último en la referencia [29] los autores obtienen una condición necesaria para que perturbaciones externas induzcan algún tipo de deformación en el condensado. En todos estos trabajos, realizados paralelamente a los resultados de esta tesis, se encuentran semillas para las conclusiones que obtenemos, si bien ninguno de ellos llega a realizar estas predicciones. Por ejemplo, con la teoría y las simulaciones de [124, 35] es posible demostrar el doblado de las líneas de vórtice, mientras que el resultado de [29] constituye una aproximación intuitiva al fenómeno de histéresis.

4.2 Modelos matemáticos

En el régimen que incluye a los experimentos de la ENS [81], resultan buenas aproximaciones tanto la aproximación de temperatura cero, como la teoría de campo medio que resulta. Así pues, siguiendo la línea de trabajo que abrimos en el Capítulo 3, modelizaremos los experimentos de generación de vórtices empleando una ecuación de Gross–Pitaevskii planteada sobre el sistema de referencia que rota

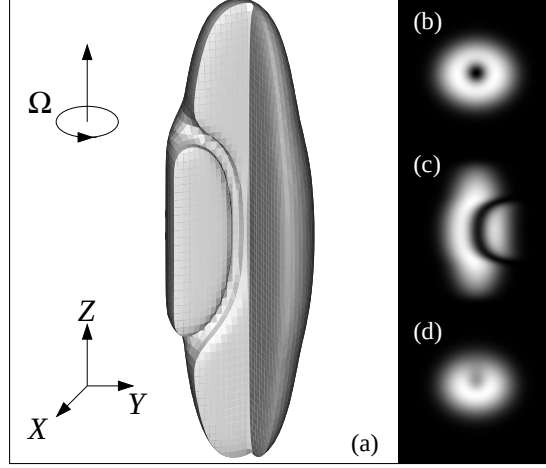


Fig. 4.2: Forma del estado fundamental del hamiltoniano (4.3) para los parámetros $\Omega = 0.75\omega_{\perp}$, $\gamma = 18.7$, $Ng = 1000$ y $\varepsilon = 0.06$. (a) Sección transversal: eliminamos un cuarto del condensado para revelar la estructura de la línea de vórtice. Densidad del condensado en (b) un corte transversal, (c) un corte longitudinal y (d) una vista superior. Hemos reducido las dimensiones longitudinales del condensado en un factor 4 para facilitar la visualización del corte.

con la trampa cuadrupolar (6.7)

$$i\frac{\partial\phi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V_0(\mathbf{r}) + U_0|\phi|^2 - \Omega L_z \right] \phi, \quad (4.1)$$

donde $L_z = i(x\partial_y - y\partial_x)$ es el operador hermítico que representa al momento angular alrededor del eje de rotación y el confinamiento efectivo viene dado por el potencial armónico

$$V_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\omega_{\perp}^2(1 - \varepsilon)x^2 + \frac{1}{2}\omega_{\perp}^2(1 + \varepsilon)y^2 + \frac{1}{2}\omega_{\perp}^2\gamma^2 z^2. \quad (4.2)$$

En la ecuación (4.1) hemos aplicado una adimensionalización conveniente en base a la longitud del oscilador armónico, $a_{\perp} = \sqrt{\hbar/m_Rb\omega_{\perp}}$, su periodo, $\tau = \omega_{\perp}^{-1}$ y la masa de los bosones. Con estas unidades el parámetro no lineal resulta $g = 4\pi a_S/a_{\perp}$, donde $a_S \simeq 5.5 \text{ nm}$ es la longitud de scattering de los átomos de ^{87}Rb . Para el resto de parámetros experimentales [81] adoptaremos $\omega_z = 2\pi \times 11.6 \text{ Hz}$, $\omega_{\perp} = 2\pi \times 232 \text{ Hz}$, y emplearemos un número de átomos, $N \sim 10^5$, que proporciona una energía de interacción efectiva $U = U_0N = 10000$. En este estudio hemos considerado deformaciones transversas de la nube atómica, que incluyen los valores $\varepsilon = 0.0, 0.03$ and 0.06 ($\varepsilon = 0.03$ es el valor más cercano al experimento [81]). Debemos resaltar que con estos parámetros resulta un

condensado muy alargado, unas 20 veces más largo que ancho [Véase la Figura 4.2(a), donde hemos reducido la longitud un factor 4 para facilitar la visualización.]

La norma, $N[\phi] = \int |\phi|^2 d\mathbf{r}$, que está relacionada con el número de bosones en el condensado, junto con la energía

$$\begin{aligned} E[\phi] &= \int \bar{\phi} \left[-\frac{1}{2} \Delta + V_0(\mathbf{r}) + \frac{U_0}{2} |\phi|^2 - \Omega L_z \right] \phi d\mathbf{r} \\ &= E_0(\phi) - \Omega L_z(\phi), \end{aligned} \quad (4.3)$$

son cantidades conservadas en la evolución temporal.

Es de esperar que tras una preparación adecuada del condensado, éste adopte una distribución de densidad estacionaria en la trampa rotante. Estas soluciones estacionarias tienen la dependencia temporal factorizada como contribución aditiva a la función de onda,

$$\phi_\mu(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t} \phi_0(\mathbf{r}),$$

y se caracterizan desde el punto de vista matemático como soluciones de la ecuación de Ginzburg-Gross-Pitaevskii (2.29) y como puntos críticos del funcional de energía sobre la hipersuperficie de norma constante $\left. \frac{\partial E}{\partial \phi} \right|_N [\phi_\mu] = 0$.

4.3 Estabilidad e histéresis

En la aproximación de temperatura cero el estado colectivo de los N bosones viene descrito por una única función de ondas dependiente del tiempo, $\phi(\mathbf{r}, t)$. La configuración del condensado en cada instante es equiparable a un punto en el espacio infinito-dimensional sobre el que se definen tanto la energía $E_0(\phi)$ como el momento angular $L_z(\phi)$.

A lo largo del tiempo el condensado puede permanecer en reposo, sobre un estado estacionario, o bien describir trayectorias en este espacio infinito. En este último caso, al tratarse de un sistema conservativo, la evolución del sistema se realiza sobre curvas de energía constante. Si conocemos la variación del funcional de energía sobre el espacio de estados, podemos determinar si la evolución del condensado permanece acotada por barreras de energía en las proximidades de un estado estacionario, o si es libre de escapar hacia configuraciones alejadas del dato inicial. Así, como se resume en la Figura 4.3, desde un punto de vista puramente energético distinguimos tres situaciones importantes

Mínimo absoluto o estado fundamental: Un estado estacionario es estado fundamental cuando el funcional de energía alcanza un mínimo absoluto sobre él. El funcional de energía sirve para aplicar el criterio de estabilidad de Lyapunov, de forma que perturbaciones pequeñas del estado fundamental permanecen acotadas a lo largo del tiempo.

Mínimo local: De nuevo el funcional de energía nos asegura la estabilidad de las soluciones en las proximidades de un mínimo local: es necesaria una aportación de energía para sacar al sistema fuera del mínimo.

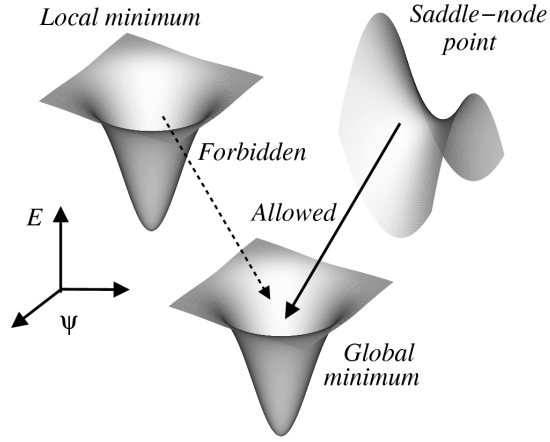


Fig. 4.3: De izquierda a derecha, tres tipos de estado estacionario importantes: mínimo local de la energía, estado fundamental o mínimo absoluto y punto de silla. Respectivamente se trata de estados metaestables, estables e inestables desde un punto de vista energético.

Puntos de silla: Las barreras de energía desaparecen y existen caminos de energía decreciente que se alejan fuera del estado. El sistema es inestable porque es posible alejar al sistema de su estado inicial tanto como queramos con una aportación de energía arbitrariamente pequeña. Al introducir correcciones no conservativas en el modelo matemático (4.1) estos estados dejan de ser experimentalmente realizables.

Estados dinámicamente inestables: Como demostramos en el Capítulo 3 existe una última familia de estados estacionarios que son completamente inestables: cualquier perturbación de los mismos crece de forma no acotada y el sistema evoluciona espontáneamente hacia configuraciones completamente distintas.

En el caso de un condensado rotante, se da la circunstancia de la rotación induce un desplazamiento en las superficies de energía que es diferente para cada estado

$$E_0(\phi) \rightarrow E_0(\phi) - \Omega L_z(\phi).$$

De esta forma es posible alterar la estabilidad de las distintas configuraciones, transformando en energéticamente favorables estados con uno, dos o más vórtices.

Consideremos por ejemplo una trampa con simetría cilíndrica. Estas trampas admiten soluciones simétricas con vorticidades crecientes,

$$\phi_\ell \propto e^{i\ell \arctan(y,x)} \quad (4.4a)$$

$$E_\ell(\Omega) = E_\ell(0) - \ell\Omega. \quad (4.4b)$$

En un experimento sin rotación la configuración energéticamente más favorable es la que carece de momento angular, $\ell = 0$. A medida que incrementamos la velocidad angular las energías de cada estado sufren un desplazamiento proporcional a la carga topológica, $\pm\ell$, de forma que pasada una velocidad angular crítica

$$\Omega_\ell = \frac{E_\ell(0) - E_0(\Omega)}{\ell}, \quad \ell = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.5)$$

el estado ϕ_ℓ , simétrico y con vorticidad ℓ , resulta energéticamente más favorable que el resto de estados simétricos. Podemos considerar la familia de frecuencias $\{\Omega_1, \Omega_2, \dots\}$ como primeras estimaciones de las velocidades críticas necesarias para crear configuraciones de vorticidades crecientes.

Sin embargo hemos de darnos cuenta de que la condición $\Omega > \Omega_m$ no implica que el vórtice ϕ_m sea un mínimo global o local de la energía. Esto es así porque las frecuencias (4.5) surgen de comparar una familia pequeña de estados y pudiera ocurrir que existan otros estados $\tilde{\phi}_m$ con menor energía que los vórtices simétricos considerados. Este es el caso, por ejemplo, para el vórtice simétrico, centrado y con carga múltiple $\ell > 2$. Este estado resulta dinámicamente inestable y puede separarse en una pareja de vórtices fuera de eje con menor energía [16, 44].

Es por este motivo que existe otra definición de velocidad crítica entendida como la velocidad angular, $\bar{\Omega}$, necesaria para estabilizar una determinada configuración. Esta definición no exige comparar las energías de todas las configuraciones, como antes, sino que basta con realizar un estudio local de la estabilidad de un estado concreto, ϕ , buscando, por ejemplo, cuándo se convierte en un mínimo local del funcional de energía.

Desde el punto de vista práctico la manera de proceder consiste en linealizar el funcional de energía y estudiar su variación para pequeñas perturbaciones, $\delta(\mathbf{r})$, sólo hasta segundo orden

$$E[\phi + \delta] = E[\phi] + E'[\phi](\delta) + E''[\phi](\delta, \delta) + \mathcal{O}(|\delta|^3). \quad (4.6)$$

Si el estado ϕ es estacionario, el término de primer orden es cero, $E'[\phi] = 0$. La elección de una base apropiada [44]

$$\delta(\mathbf{r}) = \sum_{m,j} \delta_{m,j} \psi_{m,j}(\rho, z) e^{im\theta},$$

nos permite diagonalizar la forma cuadrática

$$E''[\phi](\delta, \delta) = \sum_{m,j} \lambda_{m,j}(\Omega; \phi) |\delta_{m,j}|^2. \quad (4.7)$$

Cuando todos los autovalores $\lambda_{m,j}$ son positivos, la forma bilineal $E''[\phi]$ es positiva y por tanto el estado estacionario es estable.

Si el estado estacionario no presenta inestabilidades dinámicas y posee simetría axial, resulta sencillo encontrar la siguiente dependencia de la energía respecto de la velocidad angular

$$\lambda_{m,j}(\Omega; \phi_\ell) = \lambda_{m,j}(0; \phi_\ell) - (m - \ell)\Omega.$$

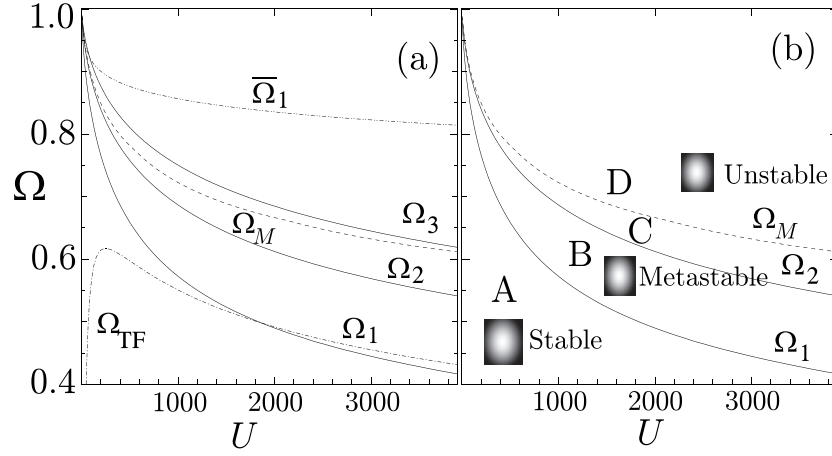


Fig. 4.4: (a) Velocidades angulares críticas para un condensado alargado ($\omega_z/\omega_\perp = 18.7$) y diferente número de átomos ($U = U_0 N = 4\pi N a_{Rb}/a_\perp$). Representamos la estimación de Thomas–Fermi para la diferencia de energía entre los estados ϕ_0 y ϕ_1 (Ω_{TF} , línea de trazos), las velocidades Ω_1, Ω_2 y Ω_3 a las que las cargas topológicas $m = 1, 2, 3$ resultan energéticamente favorables (líneas sólidas) y la velocidad angular a la que el estado sin vorticidad se convierte en punto de silla (Ω_M , línea de trazos). (b) Regiones con distinta fenomenología: entre A y C existe una barrera de energía rodeando el estado sin vorticidad; en A, B y C el estado fundamental tiene vorticidad 0, 1, y 2 respectivamente; en D la barrera de energía desaparece y es posible generar múltiples vórtices.

Estudiando la evolución de estos autovalores conocemos cómo influye la velocidad de rotación Ω en la curvatura de la superficie de energía $E(\psi)$ alrededor del estado estacionario, $\phi_{0,\pm 1}$. En particular el intervalo de velocidades en el que el estado ϕ_ℓ es un mínimo de la energía queda definido por dos velocidades críticas

$$\max_{m < \ell} \frac{-\lambda_{mj}(0; \phi_\ell)}{\ell - m} = \bar{\Omega}_\ell < \Omega < \bar{\Omega}_\ell^c = \min_{m > \ell} \frac{\lambda_{mj}(0, \phi_\ell)}{m - \ell}. \quad (4.8)$$

En general estas frecuencias críticas podrían no existir o definir un intervalo vacío, o puede ocurrir que coincidan los intervalos de estabilidad de dos configuraciones, y siendo necesario un estudio numérico de los autovalores para conocer qué ocurre en nuestro modelo.

Resumiendo, para generar un condensado con vorticidad, ϕ_1 , necesitamos una velocidad angular que sea lo bastante grande

1. para que el vórtice buscado, ϕ_1 , resulte energéticamente favorable

$$\Omega > \Omega_1;$$

2. para que ese vórtice sea dinámicamente estable

$$\Omega > \bar{\Omega}_1;$$

3. y para que desaparezcan las barreras energéticas entre el estado original de la nube atómica y el estado vórtice

$$\Omega > \bar{\Omega}_0^c \equiv \Omega_M$$

Este último punto es importante porque si la velocidad no es lo bastante grande, el condensado sin vorticidad seguirá siendo localmente estable y las leyes de conservación inhibirán la absorción de momento angular.

Con estas ideas en mente, hemos calculado numéricamente los distintos estados con vórtices simétricos, $\phi_0, \phi_1, \dots$, así como las diferentes velocidades críticas, $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \Omega_4, \bar{\Omega}_1, \bar{\Omega}_1^c$ y $\bar{\Omega}_M$. Los resultados se muestran en la Figura 4.4(a) para una trampa alargada como las empleadas en el experimento de la ENS [22].

Del cálculo de las velocidades críticas se siguen dos resultados importantes. El primero es que el intervalo de estabilidad energética del vórtice simétrico ϕ_1 es virtualmente nulo: $\bar{\Omega}_1 > \Omega_1, \Omega_2$. Así, en caso de existir un estado fundamental con vorticidad, éste nunca poseerá simetría cilíndrica. La naturaleza de los auténticos estados fundamentales se discutirá en el siguiente apartado, pues exige cálculos que van más allá del análisis de estabilidad lineal.

La segunda característica y tal vez la más importante es que el estado sin vorticidad permanece estable hasta velocidades muy elevadas, Ω_M , superiores en cualquier caso al valor requerido para que el estado fundamental adquiriera vorticidad (Regiones B y C en la Figura 4.4(b)). Para velocidades angulares inferiores a Ω_M el condensado no puede adquirir vorticidad, debido a la existencias de barreras energéticas que desaparecen por encima de dicha velocidad crítica. Esta persistente metaestabilidad o histéresis es responsable de que en los experimentos, a partir de Ω_M , se observen estados con distinto número de líneas de vórtices [22].

El fenómeno de histéresis podría evitarse condensando la nube de bosones en una trampa rotante en lugar de activar la rotación sobre una nube ya condensada¹. De esta forma esperamos que los mecanismos disipativos propios del enfriamiento evaporativo, junto con la mayor facilidad de un gas ordinario para asimilar rotación, permitan la generación de vórtices a velocidades inferiores a Ω_M [Véase Figura 4.4(b)].

4.4 Búsqueda de estados fundamentales

El estudio anterior tiene la limitación importante de reducirse a configuraciones con una simetría apropiada para el tratamiento perturbativo y, si bien concluye que un

¹ Este tipo de técnicas constituye la base del trabajo del grupo de Oxford [85], si bien este grupo aun no ha conseguido la generación de ningún vórtice. Tras la aparición los resultados que presentamos, también la ENS está empezando a desarrollar técnicas de enfriamiento en trampas rotantes [21]

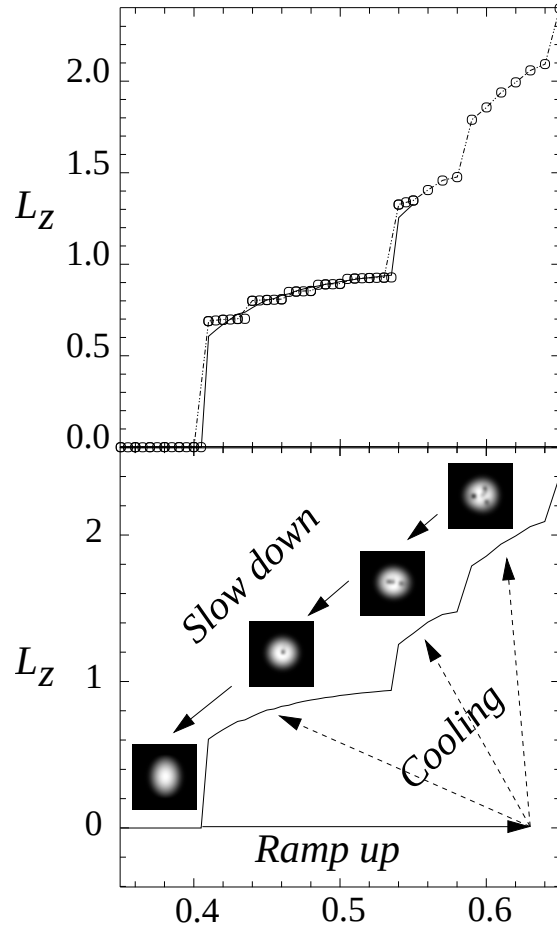


Fig. 4.5: (a) Momento angular, L_z , del estado fundamental del funcional de energía $E(\phi)$ (4.3) en función de la velocidad de rotación y para los parámetros del experimento de la ENS [81]. Mostramos con círculos las soluciones obtenidas sobre la malla con $32 \times 32 \times 64$ junto con una familia de soluciones más precisa, con $64 \times 64 \times 128$ modos. Los resultados con asimetrías distintas ($\epsilon = 0, 0.03, 0.06$) resultan apenas indistinguibles para valores tan altos de la interacción $U \sim 9000$. (b) Dibujo esquemático del momento angular del momento angular junto con una descripción gráfica del mecanismo de histéresis.

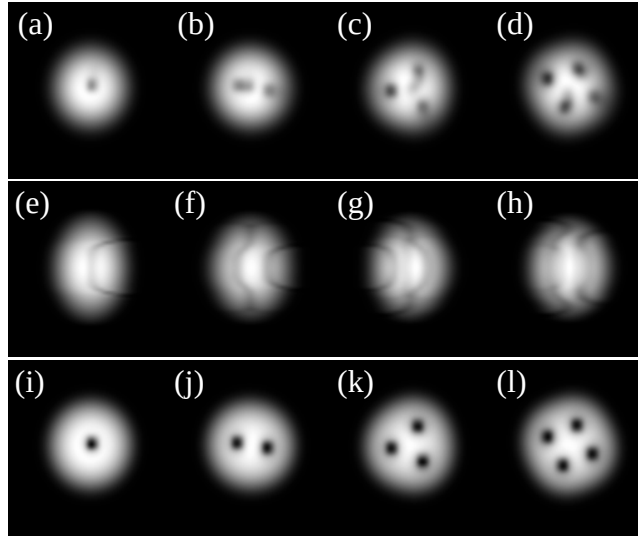


Fig. 4.6: Vistas superior (a–d) y lateral (e–h) del condensado a medida que desarrolla uno, dos, tres y cuatro vórtices para velocidades de rotación crecientes. Las vistas laterales (e–h) parecen sugerir la posibilidad de apreciar los vórtices torcidos en imágenes directas de la nube atómica. La irregularidad de (a–h) contrasta con la simetría de un corte bidimensional del condensado a media altura como los mostrados en (i–l)

vórtice simétrico no puede ser estado fundamental, no nos dice cual es la forma de las configuraciones de mínima energía. Para resolver este problema hemos estudiado numéricamente el funcional de energía (4.3) empleando una técnica conocida como gradientes de Sobolev y detallada en el Capítulo 10. Desarrollando las soluciones en bases de Fourier tridimensionales con $32 \times 32 \times 64$ y $64 \times 64 \times 128$ modos, hemos sido capaces de encontrar la forma del estado fundamental con un error inferior al 1% en el momento angular.

Los resultados se recogen en las Figuras 4.2, 4.8 y 4.6. La búsqueda de estados fundamentales confirma la existencia de una serie de frecuencias críticas $\{\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, \dots\}$ en las que tiene lugar la nucleación de vórtices adicionales. En las figuras 4.5(a-b) comprobamos el efecto que cada vórtice adicional tiene sobre el momento angular, que experimenta ligeras discontinuidades pero crece monótonamente a medida que aceleramos la trampa rotante.

Esta evolución del momento angular es similar a la predicha en [16] utilizando sólo los grados de libertad transversales del condensado. Sin embargo nuestro resultado difiere en que para un único vórtice el momento angular por partícula adopta un valor fraccionario e inferior a 1, que crece con la velocidad de rotación.

La causa de esta dependencia anómala radica en que en condensados tan alargados y con tantos bosones los vórtices se generan torcidos, como mostramos

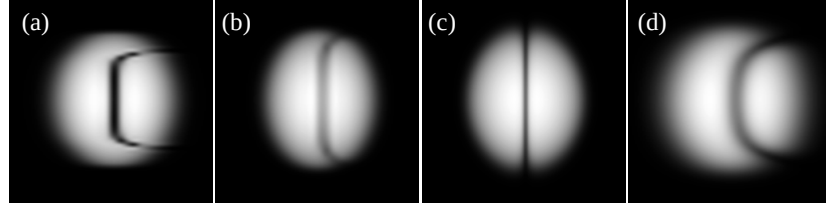


Fig. 4.7: Vistas laterales del un condensado con $N = 10^5$ átomos de ^{87}Rb y elongaciones decrecientes. Los parámetros de la trampa ($\Omega, \omega_{\perp}/2\pi, \omega_z/2\pi$) son (a) $(0.5\omega_{\perp}, 219\text{Hz}, 11.7\text{Hz})$, (b) $(0.4\omega_{\perp}, 96\text{Hz}, 25\text{Hz})$, y (c) $(0.3\omega_{\perp}, 50\text{Hz}, 50\text{Hz})$. En la figura (d) mostramos un condensado con la misma trampa que en (a), pero con la décima parte de átomos, esto es $N = 10^4$ y $\Omega = 0.53$.

en las figuras 4.2, 4.8 y 4.6. Estas configuraciones, que son estacionarias en el marco de referencia rotante y que en realidad giran sobre el marco de referencia del laboratorio, involucran principalmente la rotación del tronco del condensado, mientras que los casquetes permanecen en reposo. Esta falta de uniformidad permite a la nube de átomos puede absorber una cantidad de momento angular inferior a la propia de un vórtice centrado. Según incrementamos la velocidad angular, la línea de vórtice se vuelve más derecha y el momento angular crece de forma continua, como se aprecia en la figura 4.5(a).

El punto más importante es que el doblado del vórtice tiene lugar incluso cuando la trampa posee simetría cilíndrica. Bajo estas condiciones podemos hablar de una doble ruptura de la simetría que involucra por un lado el giro en un determinado sentido, y por otro la elección del plano sobre el que se doblará la línea de vórtice [Figura 4.2(a)].

En trampas asimétricas la elección del plano de doblado es más sencilla, pues el vórtice suele tomar la dirección más corta para salir del condensado [Figuras 4.2(b-d)]. Este fenómeno pone de manifiesto las tensiones transversales a las que está sometida la línea de vórtice, tensiones que se equilibran en el caso de trampas esféricas o aplanadas, y que en el experimento de la ENS dominan desde el punto de vista energético y dan lugar a ejes de rotación deformados.

En cualquier caso, si bien algunos apuntan a la obviedad del papel de estas tensiones transversales y en la *necesidad* de encontrar vórtices doblados, esta es una predicción que no hemos visto anunciada con anterioridad, frente a la multitud de trabajos [16, 62, 35, 44] que asumen geometrías radialmente simétricas y soluciones del tipo de (4.4).

Hemos comprobado que la magnitud del doblado de los vórtices es proporcional a la elongación de la trampa y a la intensidad de las interacciones, U . En la figura 4.7 mostramos cómo a medida que la trampa se hace más achatada o cuando disminuimos el número de átomos, la línea de vórtice recupera su verticalidad.

Debido a limitaciones de resolución, resulta de momento imposible observar *in-situ* un condensado, salvo en experimentos extremos donde el condensado adquiere

dimensiones macroscópicas. Así, resulta habitual en experimentos como los de la ENS dejar que el condensado se expanda en libertad, apagando la trampa que lo confina. De esta forma se obtienen nubes de gas extremadamente aplanadas con dimensiones macroscópicas, donde el vórtice resulta evidente como una depresión en la densidad; pero al mismo tiempo se induce una dinámica en el condensado que tiende a poner el vórtice “derecho”.

A pesar del carácter destructivo del procedimiento de expansión, es posible comparar las imágenes experimentales [Figura 4.1] con los perfiles de densidad obtenidos de la minimización numérica [Figura 4.6]. Tanto en el experimento como en la teoría de campo medio las líneas de vórtice parecen parcialmente ocupadas por el propio gas, fruto de su deformación. Nosotros pensamos que esta es una evidencia concluyente en favor de las predicciones del modelo teórico, en especial si tenemos en cuenta que los experimentos con vórtices en trampas esféricas [87] no tienen los problemas de contraste de las Figuras 4.6.

Una segunda manifestación del doblado la encontramos en experimentos recientes [80] sobre nucleación de vórtices, donde se encuentran estados que albergan valores fraccionales del momento angular por partícula, $0 < L_z < 1$, y que parecen no mostrar ninguna clase de “agujero” en las vistas superiores. Estas configuraciones se pueden explicar por medio de vórtices extremadamente doblados como los que surgen numéricamente en las proximidades de la frecuencia crítica, Ω_1 .

Por último, la nucleación de muchos vórtices torcidos simultáneamente y su interacción durante la fase de expansión libre del condensado, pueden explicar las estructuras turbulentas que aparecen cuando se sobrepasa una determinada velocidad angular [81, 22]. Es más, toda vez que admitimos la posibilidad de configuraciones con vórtices torcidos, surgen una familia de fenómenos posibles como reconexión de vórtices, anillos de vórtices, etc, viejos conocidos de la investigación con He-II.

4.5 Conclusiones

En este capítulo hemos presentado dos nuevos fenómenos en el campo de la nucleación de vórtices en condensados gaseosos. El primero consiste en la existencia de histéresis en la nucleación de estos estados: esto es, resulta necesaria una velocidad angular anormalmente alta para que la nube atómica se desestabilice y adquiera un vórtice. El estudio desarrollado en este capítulo proporciona una predicción cuantitativa de la velocidad crítica que está en consonancia con los valores experimentales. Además hemos demostrado que una vez sobrepasada la barrera energética necesaria para la generación del vórtice, se abre la posibilidad de nuclear no sólo uno, sino más vórtices, siendo el resultado de naturaleza aleatoria, como demuestran los experimentos [81].

El segundo fenómeno interesante consiste en una doble ruptura de simetría por la cual el estado fundamental de un condensado en una trampa con simetría axial

pasa de ser una nube simétrica a una nube asimétrica con un vórtice doblado. De nuevo este fenómeno permite explicar características importantes de experimentos actuales, como son las imágenes del condensado, valores del momento angular y una dinámica turbulenta.

En el futuro esperamos la confirmación o refutación definitiva de las predicciones que proporciona la teoría de campo medio por medio de experimentos más sofisticados actualmente en preparación [21] que involucran imágenes de contraste de fase y secciones transversales del condensado para estudiar la forma de los vórtices.

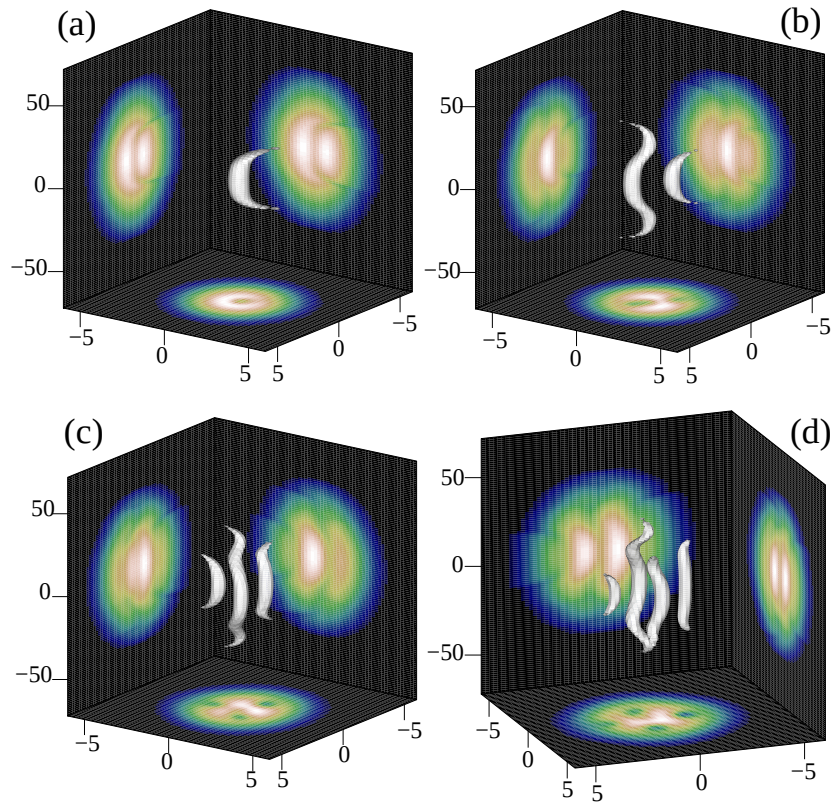


Fig. 4.8: Superficies de contorno tridimensionales de una a cuatro líneas de vórtice. Las paredes de cada dibujo representan las imágenes laterales y superior del condensado como deberían ser apreciadas en los experimentos. Flotando en estas cajas mostramos las líneas de baja densidad que constituyen el núcleo del vórtice. Las dimensiones verticales del condensado han sido reducidas en un factor 8 para enfatizar la intensidad de la deformación.

5. VÓRTICES EN CBE: SISTEMAS DE DOS COMPONENTES

Resumen

En este capítulo estudiamos la introducción de defectos topológicos en condensados de dos componentes. En la primera parte trabajaremos con una configuración sencilla, *el monopolio*, en la que el condensado adquiere forma de donut. Utilizando los grados de libertad internos de los átomos del condensado, sugerimos un montaje experimental para introducir de forma continua vorticidad en el condensado. Además, mediante un modelo simplificado somos capaces de obtener resultados analíticos sobre la estabilidad del conjunto en función de las interacciones entre especies.

En la segunda parte del capítulo aplicamos las mismas técnicas —análisis de estabilidad lineal y global— para estudiar la primera realización experimental de un vórtice en un condensado [87]. Obteniendo unas ecuaciones similares a las del monopolio, somos capaces de explicar la inestabilidad del vórtice en función de las interacciones entre las dos componentes que forman el condensado. Por último predecimos la transferencia del vórtice entre especies, fenómeno de reciente confirmación experimental [24].

5.1 Motivación

Como vimos en el Capítulo 2, los vórtices constituyen una parte central en nuestra comprensión de la superfluidez. Por este motivo en los años que han pasado desde la creación de los primeros condensados de Bose–Einstein gaseosos [6, 12, 30], son muchos los artículos que han estudiado la generación [33, 86, 18], la detección [129, 52, 27] y la estabilidad de los vórtices en el condensado [62, 63, 65, 64, 108, 44].

Si bien todos estos trabajos se centraron en el estudio de sistemas de una sola componente, el primer éxito [87] en la producción de vórtices tuvo lugar en experimentos con mezclas de dos especies de ^{87}Rb condensado. El experimento, descrito en un artículo que despertó bastante interés [66], consiste en combinar átomos de rubidio en dos estados hiperfinos distintos, denotados por $|1\rangle$ y $|2\rangle$, y utilizar una perturbación rotante, junto con radiación de microondas, para transferir átomos de un estado a otro a la vez que se induce vorticidad sobre ellos. La dinámica de los estados vórtice resultantes es complicada e incluye fenómenos tales como inestabilidades dinámicas, inestabilidades energéticas y transferencia de momento angular entre especies.

En este capítulo pretendemos obtener una descripción teórica del experimento del JILA [87]. Para ello comenzaremos por estudiar un sistema ligeramente más sencillo, formado por dos condensados confinados en la misma trampa anular, y donde la vorticidad se ve ayudada por la barrera de potencial que atraviesa el condensado. Este sistema se puede estudiar analíticamente, caracterizando la estabilidad de las distintas configuraciones en función de la interacción entre las dos especies que forman el condensado.

En la segunda parte del capítulo pasaremos a estudiar el sistema propio del experimento del JILA. Realizaremos un estudio analítico–numérico completo de la estabilidad lineal y global de los vórtices, comprobando que la teoría de campo

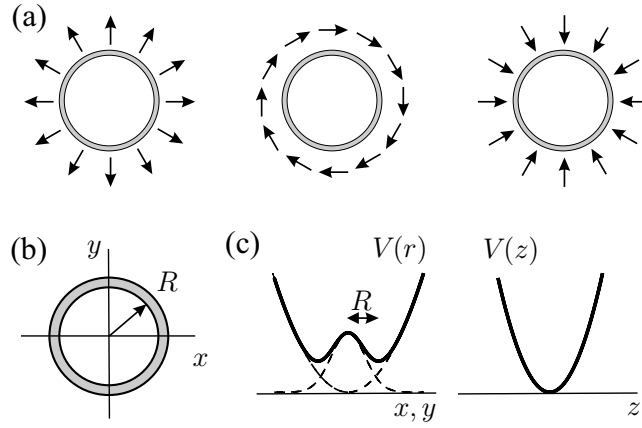


Fig. 5.1: (a) Monopolo de spin en dos dimensiones. Para $\mu \neq 0$ los espines rotan como función del tiempo. (b) Trampa de anillo. (c) Potencial $V(r, z)$

medio (Ver §2.2.1) y las peculiares interacciones que se dan en el condensado, explican completamente los resultados aparentemente anómalos del experimento. De hecho seremos capaces de predecir la transferencia de vorticidad entre las dos componentes del condensado, un hecho de reciente confirmación experimental.

5.2 Monopolos en condensados de Bose-Einstein

El primer sistema del que nos ocuparemos es una nueva clase de estado cuántico macroscópico en el que los espines atómicos del condensado apuntan en la dirección radial en el plano $x - y$ [Figura 5.1(a)]. Esta configuración presenta ciertas analogías, principalmente gráficas, con los nunca encontrados monopolos magnéticos, de ahí la elección del nombre “monopolo de spin”. En apartados sucesivos demostraremos que el monopolo puede ser estable bajo condiciones realistas y analizaremos un método para generarlos que sólo requiere tecnología presente en los experimentos actuales.

5.2.1 El modelo de anillo

Las ecuaciones

En primer lugar vamos a estudiar una muestra condensada de N átomos en la aproximación de campo medio, límite en el que vienen descritos por modelos de Gross-Pitaevskii. Los átomos tendrán al menos dos niveles internos, $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, con N_1 y N_2 átomos respectivamente. Por último confinaremos los átomos en una trampa con forma de anillo [Figura 5.1(b)] [30, 117], donde los grados de libertad

axial, z , y radial, r , se hallan congelados y la dinámica sólo depende del ángulo polar, θ .

Con las aproximaciones anteriores el estado condensado viene representado por un objeto vectorial

$$|\Psi(\theta, \tau)\rangle = \sqrt{N_1}\phi_1(\theta, \tau)|\uparrow\rangle + \sqrt{N_2}\phi_2(\theta, \tau)|\downarrow\rangle, \quad (5.1)$$

donde $\phi_{1,2}$ son las funciones de onda de movimiento correspondientes a los estados internos $|\uparrow, \downarrow\rangle$, respectivamente. La evolución de ambas funciones de onda está ligada por una pareja de ecuaciones de Gross–Pitaevskii acopladas cuya deducción pospondremos hasta la sección §5.2.2

$$i\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_1 = \left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \delta_1 + u_{11}|\phi_1|^2 + u_{21}|\phi_2|^2\right]\phi_1, \quad (5.2a)$$

$$i\frac{\partial}{\partial\tau}\phi_2 = \left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \delta_2 + u_{12}|\phi_1|^2 + u_{22}|\phi_2|^2\right]\phi_2, \quad (5.2b)$$

Las funciones de onda están normalizadas

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta |\phi_{1,2}(\theta, \tau)|^2 = 1, \quad (5.3)$$

$\delta_{1,2}$, denotan la energía de los estados internos, y las constantes $u_{ij} = u_{ji}$ ($i, j = 1, 2$) describen las interacciones mutuas. Como viene siendo habitual, hemos adimensionalizado todas las magnitudes en (5.2). En particular, los elementos de la matriz de interacción son proporcionales al número de átomos, $N_{1,2}$, a la longitud de scattering de la colisión respectiva y al cuadrado del radio del anillo [Véase la ecuación (5.12a) más adelante]

$$u_{ij} \propto R^2 \sqrt{N_1 N_2} a_{ij}.$$

Por último, la normalización de cada componente se preserva durante la evolución puesto que el acoplamiento presente en la ecuación (5.2) no conduce a la transferencia de átomos entre estados de polarización.

Estados estacionarios

Las ecuaciones (5.2) tienen soluciones estacionarias donde sólo una de las componentes tiene momento angular distinto de cero

$$\phi_1^{\text{mp}}(\theta, \tau) = e^{-i\mu_1\tau}, \quad \mu_1 = u_{11} + u_{21} + \delta_1 \quad (5.4a)$$

$$\phi_2^{\text{mp}}(\theta, \tau) = e^{i\theta} e^{-i\mu_2\tau}, \quad \mu_2 = u_{12} + u_{22} + \delta_2 + 1. \quad (5.4b)$$

Definiendo el operador de Pauli como suele ser habitual

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$

es fácil comprobar que el estado (5.1) con las funciones de onda (5.4) es un autoestado de la proyección del operador de Pauli $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ a lo largo de la dirección

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} 2\sqrt{N_1 N_2} \cos(\theta - (\mu_2 - \mu_1)\tau) \\ 2\sqrt{N_1 N_2} \sin(\theta - (\mu_2 - \mu_1)\tau) \\ N_1 - N_2 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Por tanto cuando los dos estados internos tienen la misma energía, $\mu_1 \equiv \mu_2$, el valor esperado del spin apunta hacia afuera en el plano $x - y$, como en un monopolo magnético. En cualquier otro caso los espines rotan, con velocidad angular $\mu = \mu_2 - \mu_1$, como muestra la figura 5.1(a).

Análisis de estabilidad

Para determinar si el monopolo es estable en el anillo, consideramos pequeñas perturbaciones alrededor de la solución estacionaria

$$\phi_{1,2}(\theta, \tau) = \phi_{1,2}^{\text{mp}}(\theta, \tau) + \epsilon \alpha_{1,2}(\theta, \tau).$$

Insertando esta expresión en la ecuación de Gross-Pitaevskii (5.2) y conservando únicamente los términos de orden $\mathcal{O}(\epsilon)$, obtenemos un conjunto de ecuaciones lineales acopladas para las perturbaciones $\alpha_{1,2}(\theta, \tau)$ y $\alpha_{1,2}^*(\theta, \tau)$. Desarrollando estas funciones en modos angulares

$$\alpha_{1,2}(\theta, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha_{1,2}^{(n)}(\tau) e^{in\theta}$$

y separando los términos independientes, obtenemos una familia infinita de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \vec{\alpha}^{(n)} = E \mathcal{H}_n \vec{\alpha}^{(n)}, \quad (5.6)$$

donde la incógnita es un vector columna

$$\vec{\alpha}^{(n)} = [\alpha_1^{(n)}, \alpha_1^{(-n)*}, \alpha_2^{(n+1)}, \alpha_2^{(-n+1)*}]^T. \quad (5.7)$$

El operador que gobierna la evolución temporal, $\mathcal{H}_n \equiv K_n + H^{\text{int}}$, se descompone en matrices con 4×4 elementos

$$E = \text{diag}(1, -1, 1, -1), \quad (5.8a)$$

$$K_n = \text{diag}[n^2, n^2, (n+1)^2 - 1, (n-1)^2 - 1], \quad (5.8b)$$

$$H^{\text{int}} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} \\ u_{12} & u_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.8c)$$

donde $\otimes$ denota el producto tensorial.

El análisis de estabilidad lineal pasa por diagonalizar las infinitas matrices $E\mathcal{H}_n$. La presencia de *autovalores imaginarios puros* $\pm i\lambda$ indicará la existencia de perturbaciones exponencialmente crecientes $[\alpha(\tau) = \alpha(0)e^{\lambda\tau}]$ y por tanto una inestabilidad dinámica de la solución estacionaria.

Los *autovalores reales*, por el contrario, conducen a soluciones acotadas y oscilantes $[\alpha(\tau) = \alpha(0)e^{\pm i\lambda\tau}]$. Si todos los autovalores de todas las matrices son positivos, el monopolo es un estado de mínima energía y por tanto estable Lyapunov. Por el contrario, si existe al menos un autovalor negativo, ($\lambda < 0$), existen soluciones con menor energía que el monopolo y un proceso disipativo podría, en principio, destruirlo.

Existe una última posibilidad que consiste en *matrices $E\mathcal{H}_n$ no diagonalizables*. En tal caso tendremos perturbaciones que crecen polinómicamente en el tiempo. Este tipo de resultado corresponde a una inestabilidad dinámica con una escala de tiempos mucho más lenta que en el caso exponencial.

Si bien la tarea de diagonalizar infinitas matrices puede parecer un trabajo inabordable, existe una condición suficiente para la estabilidad del estado no perturbado.

Teorema 5. *Si todas las matrices hamiltonianas $\mathcal{H}_n$ son no negativas*

$$\mathcal{H}_n \geq 0 \quad \forall n \in \mathbb{Z},$$

y el operador que proyecta sobre su núcleo P_0^n conmuta con E

$$P_0^n E - E P_0^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{Z},$$

entonces la solución estacionaria es linealmente estable.

Demostración. En primer lugar, la positividad de las matrices $\mathcal{H}_n$ asegura la positividad del funcional de energía de Gross–Pitaevskii alrededor del estado sin perturbar, de manera que todo autovalor real debe ser positivo. En segundo lugar, como el espectro de $E\mathcal{H}_n$ es igual al espectro del operador hermítico $\mathcal{H}_n^{1/2} E \mathcal{H}_n^{1/2}$, descartamos la existencia de inestabilidades dinámicas. Y por último, como $[P_0^n, E] = 0$, resulta fácil comprobar que cualquier vector del núcleo (rango) de $\mathcal{H}_n$ pertenece también al núcleo (rango) de $E\mathcal{H}_n$ y por tanto esta última matriz es simple. $\square$

Tras aplicar todas las consideraciones anteriores al monopolo encontramos dos casos distintos. El primero corresponde a $u_{11}u_{22} > u_{12}^2$. Como $K_n \geq 0$ para todo $|n| > 2$, el teorema 5 permite restringir nuestro estudio a los enteros $n = \pm 1$. El monopolo es absolutamente estable cuando el determinante y todos los menores principales de la matriz $\mathcal{H}_{\pm 1}$ son positivos

$$u_{11}u_{22} - u_{12}^2 + u_{22}/2 - 3u_{11}/2 - 3/4 > 0.$$

Fuera de esta región resulta difícil caracterizar la estabilidad del monopolo. Únicamente encontramos expresiones analíticas para los autovalores cuando las interacciones son iguales $u_{11} = u_{22} \equiv u$ (véase más adelante), situación en la que

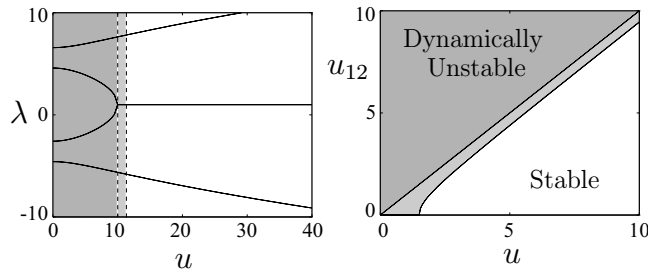


Fig. 5.2: (a) Frecuencias de excitación en función de la interacción $u_{11} = u_{22} = u$ para una repulsión mutua de $u_{12} = 10$. (b) Diagrama de estabilidad para $u_{11} = u_{22} = u$.

tenemos autovalores reales, positivos y negativos

$$\lambda = 1 \pm \left[2 \left(1 + u \pm \sqrt{1 + 2u + u_{12}^2} \right) \right]^{1/2}. \quad (5.9)$$

El segundo caso relevante desde el punto de vista experimental es $u_{11} u_{22} < u_{12}^2$. Con estos parámetros y resolviendo numéricamente las ecuaciones de autovalores encontramos siempre una pareja de autovalores complejos. En el caso particular $u_{11} = u_{22} = u$ de hecho los autovalores complejos responden la ecuación (5.9), que tiene raíces complejas. Así pues, cuando la repulsión mutua supera a la interacción de cada especie por separado, el monopo es dinámicamente inestable.

Resumiendo, las posibilidades son las siguientes

Condición	Estabilidad
$u_{12}^2 \leq u^2 - u - 3/4$	Estable
$u^2 - u - 3/4 < u_{12}^2 < u^2$	Inestabilidad energética
$u^2 < u_{12}^2$	Inestabilidad dinámica

Los autovalores y el diagrama de estabilidad para $u_{11} = u_{22} = u$ se muestran en la Figura 5.2. Para $u > u_{12}$, cuando la energía de interacción predomina sobre la energía cinética rotacional ($u \gg 1$), la solución es estable. Así pues, dado que tanto u como u_{12} son proporcionales al número de átomos, N , es posible estabilizar el monopo sin más que tomar un número lo bastante grande de bosones.

Por último debemos señalar que la inestabilidad dinámica que ocurre para $u < u_{12}$ consiste simplemente en una separación de fase entre ambas componentes. Esta separación de fase no se debe a la vorticidad, sino que tiene lugar para las soluciones homogéneas estacionarias.

5.2.2 Modelos tridimensionales

Las ecuaciones

Para determinar si el monopolio permanece estable en un entorno realista tridimensional, consideraremos un potencial confinante algo más relajado, que permita a la nube de bosones extenderse en las direcciones radial y axial [Figura 5.1(c)]

$$V(r, z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + \frac{1}{2}m\omega_r^2 r^2 + V_0 e^{-r^2/(2\sigma^2)}. \quad (5.10)$$

Esta forma corresponde a una trampa dipolar estándar con un haz láser gaussiano no resonante con las frecuencias internas de los átomos y que se propaga a lo largo de la dirección z [30, 117]. Los parámetros del haz láser son el corrimiento Stark en el centro de la trampa, V_0 , y la anchura cuadrática media del haz σ . Ambos parámetros dan lugar a la existencia de una circunferencia de mínima energía en la trampa, cuyo radio es

$$R = 2\sigma^2 \ln[V_0/(m\omega_r^2 \sigma^2)].$$

Para obtener una trama con forma de anillo basta con escoger parámetros que cumplan $R \gg \Delta r$, donde Δr es el tamaño típico de la nube atómica en las direcciones z y r .

Teniendo en cuenta ahora los grados de libertad adicionales, el estado del condensado se escribirá en la forma siguiente

$$|\Psi(r, z, \theta)\rangle = \sqrt{N_1}\psi_1(r, z, \theta)|\uparrow\rangle + \sqrt{N_2}\psi_2(r, z, \theta)|\downarrow\rangle,$$

donde las funciones de onda $\psi_{1,2}$ están gobernadas por una pareja de ecuaciones de Gross–Pitaevskii acopladas

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V + \hbar\tilde{\delta}_1 + \tilde{u}_{11}|\psi_1|^2 + \tilde{u}_{12}|\psi_2|^2 \right] \psi_1, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V + \hbar\tilde{\delta}_2 + \tilde{u}_{21}|\psi_1|^2 + \tilde{u}_{22}|\psi_2|^2 \right] \psi_2. \end{aligned}$$

Las constantes $\tilde{\delta}_{1,2}$ representan dos desplazamientos constantes de los niveles de energía; los términos no lineales dependen de una matriz simétrica de parámetros $\tilde{u}_{ij} = 4\pi\hbar^2\sqrt{N_i N_j}a_{ij}/m$; $a_{ij} = a_{ji}$ son las longitudes de scattering en onda–s correspondientes a las diferentes colisiones; y por último estamos suponiendo que las funciones de onda están normalizadas a la unidad.

Es posible establecer una conexión entre el modelo tridimensional (5.11) y el modelo de anillo (5.2) anteriormente estudiado. Para ello supondremos que la anchura de la nube es tan pequeña, $\Delta r \ll 1$, y las excitaciones axiales y radiales tan costosas que ambos grados de libertad se hallan, en la práctica, congelados. Si el número de átomos en cada estado interno es del mismo orden de magnitud, $N_1 \sim N_2$, podemos reducir la dimensionalidad de las ecuaciones (5.11) definiendo

$$\psi_{1,2}(r, z, \theta, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} f_{1,2}(r, z) \phi_{1,2}(\theta, t),$$

proyectando ambas ecuaciones sobre f_i^* e integrando respecto de r y z . Así obtenemos para las envolventes $\phi_{1,2}$ ecuaciones unidimensionales con condiciones de contorno periódicas (5.2) con los parámetros

$$u_{ij} = 2\sqrt{N_i N_j} R^2 a_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} r dr |f_i(r, z)|^2 |f_j(r, z)|^2, \quad (5.12a)$$

$$\delta_i = \frac{2mR^2}{\hbar^2} (\hbar \tilde{\delta}_i + \epsilon_i), \quad \tau = \frac{\hbar}{2mR^2} t, \quad (5.12b)$$

donde ϵ_i es el valor medio del término cinético y del potencial para la función de onda f_i .

Soluciones estacionarias

En lo que sigue trabajaremos con soluciones estacionarias que son el equivalente tridimensional del monopolo

$$\psi_1(r, z, \theta, t) = \sqrt{N_1/2} f_1(r, z) e^{-i\tilde{\mu}_1 t}, \quad (5.13a)$$

$$\psi_2(r, z, \theta, t) = \sqrt{N_2/2} f_2(r, z) e^{i\theta} e^{-i\tilde{\mu}_2 t}. \quad (5.13b)$$

Aquí los grados de libertad axiales y radiales vienen descritos por una pareja de funciones reales normalizadas, f_1 y f_2 , que satisfacen

$$\tilde{L}_{1,2} f_{1,2} = 0,$$

con los operadores no lineales

$$\begin{aligned} \tilde{L}_n = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{d^2}{dz^2} - \frac{(n-1)^2}{r^2} \right] + V(r, z) \\ & - \hbar \tilde{\delta}_n - \hbar \mu_n + \tilde{u}_{1n} f_1^2 + \tilde{u}_{2n} f_2^2. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Nos concentraremos en el caso particular $\tilde{u}_{11} = \tilde{u}_{22} \equiv \tilde{u}$, con cierta relevancia desde el punto de vista experimental. En el límite de anchura pequeña, $R \gg \Delta r$, el término centrífugo en el operador $\tilde{L}_2$ puede aproximarse por una constantes $\hbar^2/(2mR^2)$. Cuando no hay separación de fase $a > a_{12}$, además encontramos soluciones que coexisten en todo el espacio

$$\begin{aligned} f_1(r, z) &= f_2(r, z) \equiv f(r, z) \\ \tilde{\mu} &\equiv \tilde{\mu}_2 - \tilde{\mu}_1 = \hbar/(2mR^2) + \tilde{\delta}_2 - \tilde{\delta}_1. \end{aligned}$$

En este régimen la solución monopolar (5.13) es un autoestado del operador spin proyectado, $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$, sobre la dirección

$$\vec{n} = [\cos(\theta - \tilde{\mu}t), \sin(\theta - \tilde{\mu}t), 0],$$

con un autovalor distinto en cada punto del espacio y proporcional a $|f(r, z)|^2$. Así pues, el estado (5.13) representa una distribución monopolar de espín sobre cada plano $x - y$, donde la longitud del espín en cada punto depende de la densidad local.

Estabilidad

Vamos a analizar la estabilidad de las soluciones monopulares (5.13). Para ello linealizaremos las ecuaciones alrededor de la solución estacionaria, estudiando cómo evolucionan las perturbaciones $\alpha_{1,2}$. De nuevo será posible descomponer las perturbaciones en serie de Fourier con distintos modos angulares, $e^{i\theta}$. Así obtenemos una familia infinita de operadores matriciales con dimensión 4×4 generados a partir de los operadores lineales (5.14) y de las matrices (5.8)

$$\mathcal{H}_n = \tilde{L} + \tilde{K}_n + \tilde{H}^{\text{int}}, \quad (5.15a)$$

$$\tilde{L} = \text{diag}(\tilde{L}_1, \tilde{L}_1, \tilde{L}_2, \tilde{L}_2), \quad (5.15b)$$

$$\tilde{K}_n = \hbar^2/(2mr^2)K_n, \quad (5.15c)$$

$$\tilde{H}^{\text{int}} = f^2 H^{\text{int}}. \quad (5.15d)$$

Empleando la condición $R \gg \Delta r$ convertimos los operadores lineales $L_1 = L_2$ en aproximadamente equivalentes y por tanto $\tilde{L} = L_1$ resulta proporcional a la identidad.

Puesto que sólo nos interesa la estabilidad del monopolo, analizaremos la positividad del operador $\mathcal{H}_n$, que es garantía suficiente de estabilidad Lyapunov. De nuevo, dado el carácter creciente de la energía de las excitaciones, nos basta con estudiar los modos de baja frecuencia angular, $|n| < 0$. Aquí cabe distinguir dos regímenes distintos:

Interacción débil: En el límite $N(a + a_{12})/R \ll 1$ la energía de interacción $N\tilde{u}/[2\pi R(\Delta r)^2]$ es despreciable frente a la energía de confinamiento debida al potencial armónico. En este caso la nube adopta una forma de anillo con anchura igual a la longitud típica de la trampa armónica $\Delta r \simeq a_0 = [\hbar/(m\omega)]^{1/2}$. El espectro del operador linealizado $\mathcal{H}_{0,\pm 1}$ está entonces dominado por los términos de energía cinética axial y radial $\tilde{L}$, con un espectro de excitación equiespaciado $k\hbar\omega$ ($k \in \mathbb{Z}$) y positivo, salvo una familia de modos neutros, $k = 0$, que corresponde a modulaciones del estado no perturbado, $\alpha_{k=0}(r, z, \theta) \propto f(r, z) \exp im\theta$. En este subespacio los autovalores de la ecuación linealizada vienen dados únicamente por las excitaciones angulares, $\tilde{\lambda} = \hbar^2/(2mR^2)\lambda$, ($|\tilde{\lambda}| \ll \hbar\omega$), donde el autovalor λ surge de las ecuaciones del modelo de anillo (5.6). El resto de perturbaciones, $k > 0$, son de energía demasiado grande como para producir inestabilidades (Véase el Teorema 5).

Interacciones fuertes: El límite opuesto al caso anterior lo constituye la aproximación de Thomas–Fermi, donde las interacciones entre átomos dominan al resto de contribuciones a la energía. En este caso la nube adopta una forma de anillo con anchura $\Delta r = a_0[32N(a + a_{12})/R]^{1/4}$. Ahora no es posible separar las excitaciones angulares de las que involucran un cambio en las dimensiones del anillo. Sin embargo un estudio de los operadores involucrados en (5.15) nos permite obtener [41] un criterio de estabilidad suficiente, $u - u_{12} > 1$ equivalente al derivado con el modelo de anillo.

Así pues queda demostrado que en ausencia de separación de fase, $u > u_{12}$, el condensado puede adquirir vorticidad en una de las componentes, adoptando una configuración de monopolo que es un mínimo local de la energía y por tanto resulta energéticamente estable¹

5.2.3 Montaje experimental

Para finalizar propondremos una configuración particular que permite generar un monopolo de espín en un condensado de Bose–Einstein realizado con átomos de sodio en el estado fundamental hiperfino, $F = 1$. Supondremos que la energía del nivel hiperfino $m_F = 0$ es superior de manera que éste no participa en la dinámica. Esta condición se alcanza empleando un haz láser fuera de resonancia o radiación de radio–frecuencia junto con el hecho de que los coeficientes de Clebsch–Gordan son diferentes para los estados $m = 0$ y $m = \pm 1$. Eliminando los átomos con $m = 0$ nos aseguramos de que las colisiones no cambien el espín, pudiendo identificar $|\uparrow\rangle = |F = 1, m_F = 1\rangle$ y $|\downarrow\rangle = |F = 1, m_F = -1\rangle$. Con estos estados internos se cumple además $\tilde{u}_{11} = \tilde{u}_{22} \equiv \tilde{u}$.

Para generar el monopolo de espín bidimensional (5.13) proponemos la utilización de un haz Raman fuera de resonancia. Los átomos se encontrarán inicialmente condensados en el estado $|\uparrow\rangle$. Entonces conectaremos el haz láser Raman que acopla los niveles $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$. Es posible² imponer una dependencia apropiada sobre la fase de este haz para que al transferir los átomos $|\uparrow\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$, estos adquieran momento angular en la dirección z .

Denotando con $\Omega(z, r, \theta)$ la frecuencia de Rabi efectiva, la evolución del estado condensado responde a las ecuaciones de Gross–Pitaevskii con un término de acoplo adicional entre ψ_1 y ψ_2 que es proporcional a Ω . La desintonía del láser Raman se incorpora en las definiciones de $\tilde{\delta}_{1,2}$. Partiendo de $\tilde{\delta}_1 \gg \tilde{\delta}_2$, para que el láser no afecte al estado atómico interno, cambiamos adiabáticamente la diferencia $\tilde{\delta}_2 - \tilde{\delta}_1$ hasta que ambos estados internos poseen la misma energía $\tilde{\delta}_2 - \tilde{\delta}_1 \simeq 0$. En el proceso observamos cómo se transfiere un 50% de la población [Figura 5.3] entre estados, alcanzando la configuración del monopolo.

Este método es mucho más robusto que el propuesto en trabajos anteriores [33] para generar vórtices, puesto que las funciones de onda espaciales permanecen esencialmente constantes durante la transferencia $f_{1,2}(r, z)$. De hecho es posible utilizar únicamente un pulso de duración $\pi/2$, manteniendo $\tilde{\delta}_1 = \tilde{\delta}_2$, y alejándonos por tanto del régimen adiabático. Si hacemos esto, el proceso se efectúa en una escala de tiempo mucho más rápida, del orden de unos pocos periodos típicos de la trampa [$t \sim 1/\omega$].

¹ El criterio a aplicar es el de la estabilidad Lyapunov: en esencia, el monopolo constituye un mínimo de la energía, pero la energía es una cantidad conservada en la evolución temporal, de manera que perturbaciones no demasiado intensas se mantienen acotadas en las proximidades del mínimo.

² Como se propone en [33], este efecto se consigue mezclando dos ondas estacionarias que se propagan sobre las direcciones x y y respectivamente, con una diferencia de fase $\sin(kx) +$

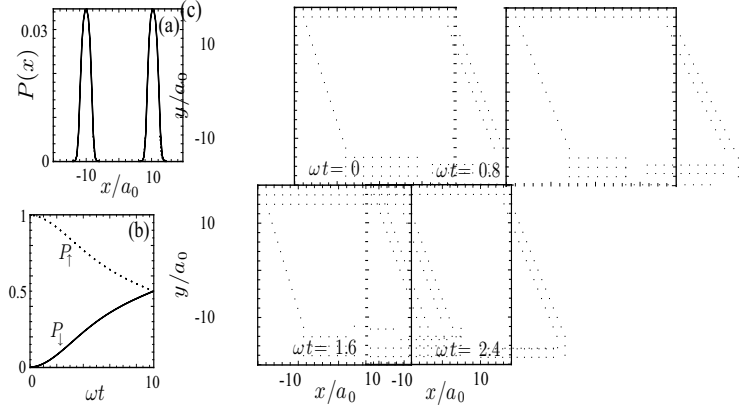


Fig. 5.3: Preparación experimental del monopolo bidimensional de espín. Parámetros de la trampa: $\omega_z = 2\omega_r$, $R = 10a_0$, $\sigma = 5a_0$, $V_0 = 200\hbar\omega_r$, con $a_0 = (\hbar/m\omega)^{1/2}$; interacciones: $\tilde{u}_{11} = \tilde{u}_{22} = \tilde{u}_{12}/0.9 = 3600\hbar\omega_r a_0^3$; parámetros del láser: $\Omega(r) = \Omega_0[\sin(kx) + i\sin(ky)]$ con $\Omega_0 = 0.28\omega_r$ y $k = \pi/(6R)$. Todas las gráficas aparecen en unidades adimensionales. (a) Distribución de densidad final $|\psi_1|^2$ (línea a trazos) y $|\psi_2|^2$ (línea continua, apenas indistinguibles una de la otra), evaluada sobre la línea $y = z = 0$ como función de x . (b) Evolución de las poblaciones de ambos estados internos, $|\uparrow\rangle$ (línea de trazos) y $|\downarrow\rangle$ (línea continua). (c) Evolución de la densidad de espín después de la preparación para un desfase $\delta_2 - \delta_1 = 2\omega_r$; los triángulos apuntan en la dirección del valor esperado del operador $\langle \vec{\sigma} \rangle$ y su tamaño es proporcional a la densidad local.

Para comprobar la viabilidad de nuestra proposición experimental se han realizado simulaciones numéricas tridimensionales de las ecuaciones de Gross–Pitaevskii con las condiciones sugeridas. Dichas simulaciones se efectuaron empleando un método de colocación de Fourier con $80 \times 80 \times 40$ modos, integrando en el tiempo con la ayuda de una técnica conocida como “operador split–step”.

Los resultados se muestran en las Figuras 5.3(a-c) para un posible experimento con sodio, donde $\omega_r = 100\text{Hz}$, $a_0 = 2\mu\text{m}$ y $a = 52a_B$, y en el que suponemos una media de 2×10^5 átomos. En la Figura 5.3(a) representamos el perfil de densidad al finalizar el proceso de transferencia. En ella se aprecia que ambas componentes adoptan prácticamente la misma distribución de densidad, $f_1 \simeq f_2$, como habíamos supuesto. El proceso de transferencia aparece en la Figura 5.3(b), donde se comprueba la rapidez del mismo. Por último, en la Figura 5.3(c) representamos cómo evoluciona el estado monopolar una vez apagado el láser que conectaba ambos estados internos. La estabilidad del monopolo se ha confirmado minimizando el funcional de energía.

$i\sin(ky) \simeq k(x + iy)$ donde k es lo bastante pequeño.

5.3 Los experimentos de Colorado

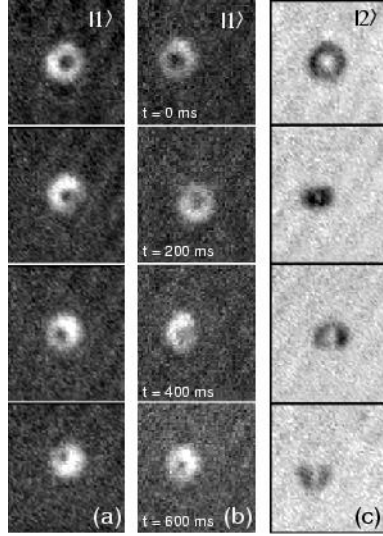


Fig. 5.4: Imágenes del experimento del JILA [87] donde se observa la desaparición del vórtice cuando se encuentra en la componente $|2\rangle$ y su estabilidad en caso contrario.

Como ya mencionamos en la introducción, el primer experimento [87] que consiguió generar vórtices en condensados de Bose–Einstein generación de vórtices lo hizo por medio de un condensado de rubidio–87 formado por dos especies del mismo isótopo. La idea, desarrollada en [66], es similar al método de generación de monopolos y consiste en trasvasar bosones entre ambos estados internos, $|1\rangle$ y $|2\rangle$, a la vez que se dota a los bosones de momento angular. La novedad estriba no tanto en la idea de utilizar este grado de libertad adicional, como en introducir el momento angular por medio de un haz láser que gira imprimiendo una fase local por medio del efecto Stark.

El resultado del experimento son nubes de condensados en las que un nivel hiperfino carece de vorticidad y el otro alberga un único vórtice centrado. Sin embargo, debido a las diferencias entre las longitudes de scattering de cada

especie, $u_{11} > u_{12} > u_{22}$, ocurre que dicho vórtice sólo es estable cuando se encuentra sobre la especie $|1\rangle$. Si realizamos el proceso inverso, dotando a los átomos de $|2\rangle$ de momento angular, se observa cómo el vórtice desaparece [87]. Semejante resultado despertó toda una serie de explicaciones artificiales, basadas en fenómenos disipativos extraordinariamente potentes.

En los siguientes apartados explicaremos la inestabilidad del vórtice en términos puramente dinámicos, utilizando la teoría de campo medio con las ecuaciones de Gross–Pitaevskii acopladas, sin recurrir a modelos disipativos. Para ello realizaremos un análisis de estabilidad lineal similar al iniciado con el monopolo, pero utilizando aproximaciones numéricas para realizar los cálculos. Comenzaremos por resolver las ecuaciones estacionarias encontrando los estados estacionarios de menor energía. Identificaremos tres soluciones con el estado fundamental de momento angular cero y con las dos realizaciones experimentales de la referencia [87]. A continuación estudiaremos la estabilidad lineal de cada estado, encontrando que sólo una de las configuraciones experimentales es linealmente estable. Finalmente, por medio de simulaciones numéricas, estudiaremos condiciones realistas en las que el condensado sufre perturbaciones más fuertes y encontraremos una rica dinámica que incluye la transferencia del vórtice entre ambas componentes y la

generación de estados turbulentos.

5.3.1 Teoría de campo medio

Para modelizar el experimento del JILA utilizaremos la aproximación de temperatura cero, en la que despreciamos la fracción no condensada de la nube atómica. Aplicando esta aproximación a un sistema de dos componentes obtenemos una pareja de ecuaciones de Gross–Pitaevskii acopladas³

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1 + u_{11} |\psi_1|^2 + u_{12} |\psi_2|^2 \right] \psi_1, \quad (5.16a)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_2 + u_{21} |\psi_1|^2 + u_{22} |\psi_2|^2 \right] \psi_2, \quad (5.16b)$$

donde la interacción viene determinada por las constantes $\tilde{u}_{ij} = 4\pi\hbar^2 \sqrt{N_i N_j} a_{ij} / m$, N_i es el número de partículas en el estado $i = 1, 2$, y $a_{ij} = a_{ji}$ denota las tres longitudes de scattering en aproximación de onda-S. Como es habitual, supondremos que las funciones de onda están apropiadamente normalizadas

$$\int |\psi_1(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int |\psi_2(\vec{r})|^2 d\vec{r} \equiv 1.$$

En analogía con los experimentos, asumiremos que ambos potenciales son iguales, concéntricos y esféricamente simétricos, $V_1(\vec{r}) = V_2(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2(r^2 + z^2)$. También supondremos que los átomos se reparten por igual en cada estado interno, $N_1 = N_2 = N$. Y por último, para simplificar el análisis, adimensionalizaremos las ecuaciones utilizando como unidades la longitud característica de la trampa, $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, su periodo, $\tau = 1/\omega$, y la masa de los átomos de rubidio, m . Con este conjunto de unidades los coeficientes no lineales pasan a ser $u_{ij} = 4\pi a_{ij} \sqrt{N_i N_j} / a_0$. En el experimento del JILA, donde $\omega = 2\pi \times 7.8 \pm 0.1 \text{ Hz}$, tenemos como unidad de tiempo $\tau \simeq 20.4 \text{ ms}$.

Suponiendo poblaciones iguales de los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$, las constantes de interacción adoptan la siguiente forma [57]

$$U = g \begin{pmatrix} 1.00 & 0.97 \\ 0.97 & 0.94 \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

Hemos estudiado valores del coeficiente de interacción $g \propto 4\pi N a_0$, de hasta $g \sim 5000$. Estos valores permanecen dentro del orden de magnitud de los experimentos; sin embargo esperamos que tanto el análisis de estabilidad lineal como las simulaciones cambien poco para interacciones aún más fuertes, de manera que los resultados sean estensibles a condensados varios millones de átomos.

³ Todo el estudio, incluido el análisis de estabilidad lineal y las simulaciones numéricas, se ha realizado sobre las ecuaciones tridimensionales, aunque también hemos comprobado la validez de los mismos resultados en una versión bidimensional del problema.

Es importante señalar que las constantes de interacción guardan las siguientes relaciones

$$u_{11} > u_{12} > u_{22}, \quad (5.18)$$

$$u_{11} u_{22} < u_{12}^2, \quad (5.19)$$

que sitúan este experimento fuera de la región de estabilidad del monopolo (Ver §5.2.1). Intuitivamente, de acuerdo con estos valores, podemos formarnos la siguiente imagen sobre el experimento: por un lado tenemos la segunda componente que “persigue” a la componente $|1\rangle$, por la que se siente atraída; mientras que la primera componente “rechaza” mezclarse con el perseguidor. En consecuencia, cualquier estado energéticamente favorable implica que la primera componente se extienda sobre la mayor parte del espacio, lo que tiene importantes consecuencias sobre la dinámica de estos condensados, como veremos a continuación.

5.3.2 Estados estacionarios

Nos interesa estudiar configuraciones estacionarias con un valor bien definido del momento angular de cada componente. Estos estados poseen la dependencia temporal factorizada y, suponiendo que preservan la simetría axial del problema, podemos escribirlos de la siguiente forma

$$\psi_i(r, z, \theta) = e^{-i\mu_i t} e^{im_i \theta} \phi_i(r, z). \quad (5.20)$$

Estas funciones satisfacen un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales, no lineal y fuertemente acoplado

$$\mu_t \psi_i = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i + \frac{1}{2} (r^2 + z^2) \psi_i + \sum_{j=1,2} u_{ij} |\psi_j|^2 \psi_i, \quad (5.21)$$

con $i = 1, 2$. Nos concentraremos en tres configuraciones importantes que son los estados de mínima energía sobre los subespacios de vorticidades $(m_1, m_2) = (0, 0)$, $(1, 0)$ y $(0, 1)$. Estas soluciones se corresponden con el estado fundamental del condensado y con el estado vórtice sobre la especie $|1\rangle$ y $|2\rangle$, respectivamente.

Para calcular las dependencias radial y longitudinal de las funciones de onda, $\phi_i(r, z)$, expandimos las soluciones en un subconjunto de la base de estados del oscilador armónico,

$$\phi_i(r, z) \simeq \sum_{n=0}^{n=N} c_n P_n^{(m_i)}(r, z) e^{-r^2/2} e^{-z^2/2}$$

y buscamos las soluciones⁴ de mínima energía para cada par (m_1, m_2) , obteniendo tanto los perfiles de densidad, como el potencial químico de cada especie y sus energías [Véase la Figura 5.5(a)].

⁴ Los detalles de este método se encuentran en el Capítulo 3 y en [44]

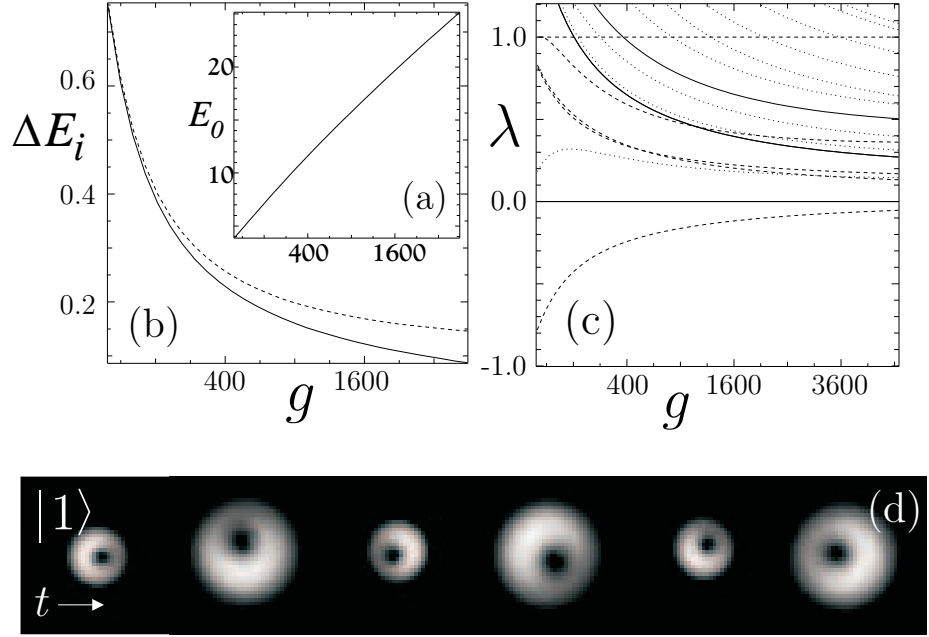


Fig. 5.5: (a) Energía del estado fundamental, (0, 0); (b) energía de las configuraciones (1, 0) (línea continua) y (0, 1) (línea de trazos), relativas al estado fundamental; y (c) frecuencias de los modos lineales alrededor del estado estable (1, 0), como función del parámetro de interacción g [Ecuaciones (5.17)]. (d) Vista superior de la componente $|1\rangle$ con un vórtice, después de una perturbación intensa de la nube con $g = 1500$. Las imágenes distan entre sí 10 unidades adimensionales de tiempo, y cada una mide 18×18 unidades espaciales.

5.3.3 Análisis de estabilidad lineal

Necesitamos estudiar el comportamiento de las soluciones estacionarias bajo perturbaciones infinitesimales. Para ello escribimos las excitaciones en la forma conveniente

$$\psi_i(r, z, \theta) = e^{-i\mu_i t + im_i \theta} (\phi_i(r, z) + e^{-i\lambda t + in\theta} \alpha_i(r, z)), \quad (5.22a)$$

$$\bar{\psi}_i(r, z, \theta) = e^{i\mu_i t - im_i \theta} (\bar{\phi}_i(r, z) + e^{-i\lambda t - in\theta} \beta_i(r, z)). \quad (5.22b)$$

e introducimos estas expresiones en la ecuación (5.16). Conservando únicamente los términos de orden $\mathcal{O}(\alpha)$ y $\mathcal{O}(\beta)$, obtenemos un sistema de ecuaciones lineales para las perturbaciones $\vec{W} = [\alpha, \alpha^*, \beta, \beta^*]$ en la que aparecen el producto de un operador hermítico, H , y otro antihermítico

$$iJ\partial_t \vec{W} = H\vec{W}.$$

El paso siguiente consiste en buscar una base de Jordán para esta ecuación,

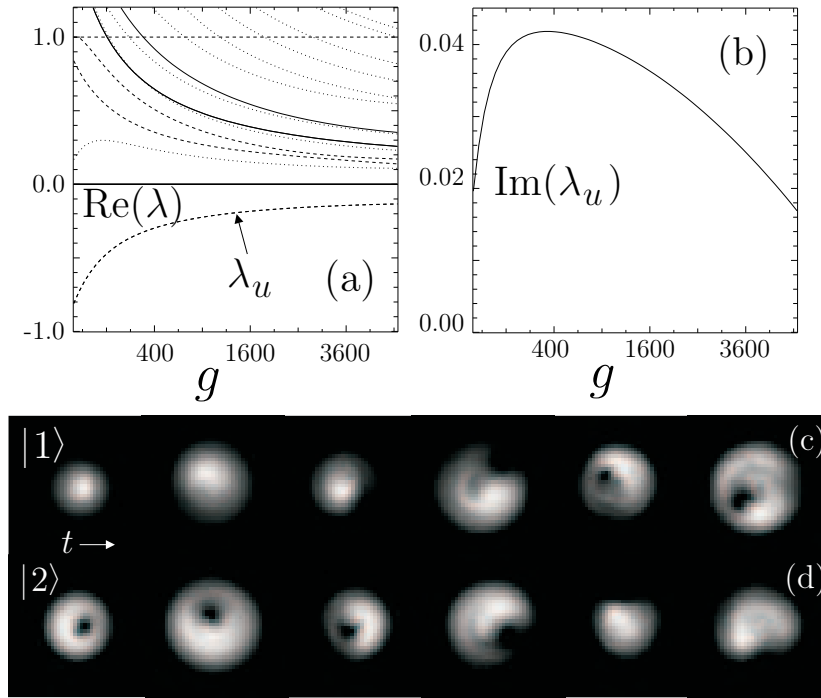


Fig. 5.6: (a) Frecuencias de respuesta lineal alrededor del estado inestable, $(0, 1)$; (b) componente imaginaria del modo desestabilizante. (c-d) Vista superior de la evolución de un vórtice inestable sometido a una perturbación inicial, para $g = 1500$. Mostramos las especies (c) $|1\rangle$ y (d) $|2\rangle$. Las imágenes han sido tomadas en intervalos de 10 unidades de tiempo y muestran una región del espacio de 18×18 unidades de grande. Resulta apreciable cómo se transfiere el vórtice de una a otra componente.

encontrando los modos que cumplen

$$\lambda \vec{W} = -iJH\vec{W}.$$

Como vimos en el caso del monopolo, la ausencia de esta forma diagonal, o la presencia de autovalores complejos, $\text{Im}\{\lambda\} \neq 0$, conduce a la aparición de inestabilidades polinómica o exponencialmente crecientes. Cualquier otro tipo de soluciones sólo conlleva la existencia de perturbaciones acotadas, tal vez potencialmente dañinas si $\exists \lambda < 0$ y nos hallamos en presencia de disipación.

En primer lugar hemos diagonalizado las ecuaciones lineales para el estado con $(m_1, m_2) = (0, 0)$, obteniendo únicamente autovalores positivos. Esto implica que la solución sin momento angular es un mínimo del funcional de energía, y por tanto localmente estable. De hecho un estudio más completo del problema revela que es el estado fundamental del sistema y globalmente estable.

A continuación estudiamos la familia $(1, 0)$ [Figura 5.5(c)], y encontramos que existe un autovalor negativo entre una familia infinita numerable de autovalores positivos. Este resultado implica que existen caminos de energía decreciente en el espacio de configuraciones. Estas direcciones involucran perturbaciones que desplazan el vórtice hacia afuera del condensado [108]. Sin embargo, al no existir autovalores complejos, este fenómeno sólo actúa en las escalas de tiempo características de la disipación y las pérdidas por colisiones. De hecho estos mecanismos disipativos deben ser muy débiles en la práctica, como lo demuestra la supervivencia del estado $(1, 0)$ en los experimentos [87].

Es importante señalar que la existencia de un autovalor negativo en el espectro linealizado alrededor del estado $(1, 0)$ contradice la creencia de que la segunda componente podría actuar como potencial de anclaje, convirtiendo el vórtice en un mínimo local de la energía, como de hecho ocurre en el monopolo. Antes bien, un estudio más completo confirma que el estado $(1, 0)$ es energéticamente inestable incluso para proporciones distintas de cada especie, que van desde $N_1 \simeq 0$ hasta $N_2 \simeq 0$ [96].

Por último hemos analizado la configuración $(0, 1)$. Aquí encontramos un número infinito de modos con energía positiva, más una pareja de modos con frecuencia negativa y autovalor complejo, λ_u , [Figura 5.6(a-b)]. Cualitativamente, la forma e intensidad de los modos inestables es similar a aquellos de energía decreciente de la familia $(1, 0)$ —esto es, son perturbaciones que expulsan el vórtice fuera de la nube atómica. La diferencia estriba en que debido a la componente imaginaria del autovalor, $\text{Im}(\lambda_u) = \mathcal{O}(0.04)$ [Fig. 5.6(b)], un vórtice de carga unidad situado en la especie $|2\rangle$ es inestable bajo perturbaciones aleatorias del dato inicial. Este resultado es consistente con la inestabilidad del vórtice $|2\rangle$ en los experimentos [87].

Como mencionamos anteriormente, la inestabilidad de este tipo de configuraciones no depende drásticamente de la condición $N_1 \sim N_2$, pero sí es cierto que para valores pequeños de la componente sin vorticidad, $N_2 \gg N_1$, el vórtice se convierte estable en la práctica [96] pues su vida excede con mucho a los tiempos resolubles numérica y experimentalmente. Por último hemos de señalar que este resultado es consistente con el límite de una sola componente, $N_1 = 0$ donde el vórtice de carga unidad resulta dinámicamente estable para cualquier valor de la interacción u_{22} (Véase el Capítulo 3 o la referencia [44]).

5.3.4 Análisis de estabilidad global

El análisis de estabilidad lineal no puede utilizarse para obtener conclusiones sobre la dinámica del vórtice más allá del régimen de perturbaciones infinitesimales. Para conocer mejor el comportamiento de los estados estables e inestables hemos preparado una serie de simulaciones numéricas que reproducen perturbaciones realistas de cada configuración. Las perturbaciones elegidas varían desde pequeños desplazamientos del vórtice, que deberían responder al análisis lineal, hasta fuertes perturbaciones del dato inicial, consistentes en generar los estados vórtice con

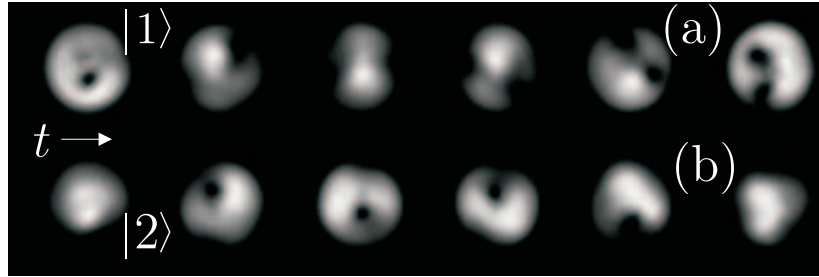


Fig. 5.7: Evolución de una configuración inestable $(0, 1)$ sujeta a perturbación de amplitud moderada, después de 50 unidades de tiempo, con $g = 1500$. De desarrolla caos espacio-temporal con múltiples vórtices. Mostramos las vistas superior del conjunto, equiespaciadas 10 unidades de tiempo y con una extensión de 18×18 unidades espaciales.

unas dimensiones diferentes de las estacionarias. Las simulaciones numéricas se han realizado empleando un método “split-step” simetrizado sobre una base de Fourier discreta, utilizando mallas de $32 \times 32 \times 32$ a $64 \times 64 \times 64$ modos.

De las simulaciones numéricas extraemos varias conclusiones. En primer lugar, el estado linealmente estable, $(1, 0)$, resulta particularmente robusto y sobrevive a un amplio rango de perturbaciones, respondiendo, como mucho, con una precesión del vórtice más oscilaciones en las dimensiones de ambas componentes [Figura 5.5(d)].

La configuración inestable, $(0, 1)$, por otro lado, demuestra su inestabilidad incluso con las perturbaciones más débiles, dando lugar siempre al mismo tipo de dinámica recurrente, representada en las Figuras 5.6(d-e). Este mecanismo consta de un primer estadio en el que la componente $|1\rangle$ y el vórtice oscilan sincronamente. La precesión aumenta en amplitud hasta que el vórtice deja de ser reconocible y el conjunto forma una especie de ying-yang rotante. Finalmente la primera componente desarrolla una cola y después un agujero en el que queda atrapada la segunda componente. Dicho agujero es un vórtice que ha sido transferido de la segunda a la primera especie. Aunque no es completamente periódico, este mecanismo exhibe cierta recurrencia y el vórtice oscila entre una y otra especie ab-eternum.

El mecanismo de transferencia persiste incluso para perturbaciones de gran amplitud, pero ahora la recurrencia desaparece y nos encontramos con una dinámica más rica que incluye el nacimiento de caos espacio-temporal. Como ejemplo, la Figura 5.7 muestra un régimen en el que se introducen más de un vórtice en la primera componente

Cualquiera de estos fenómenos, sea la transferencia del vórtice o su evolución caótica, no contradicen ninguna restricción topológica ni ninguna ley de conservación. De hecho, debido al acoplo entre especies, el momento angular de cada componente no es una cantidad conservada, y sólo el momento angular total se

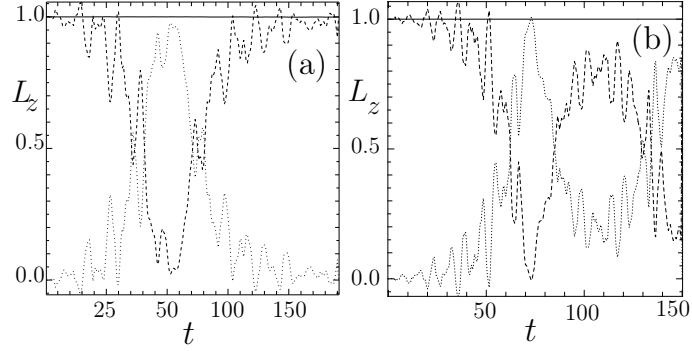


Fig. 5.8: Momento angular total L_z (línea continua), y momentos angulares parciales $L_z^{(1)}$ (puntos) y $L_z^{(2)}$ (trazos), frente al tiempo, en unidades adimensionales de tiempo. La gráfica (a) corresponde a una situación sencilla, con dinámica recurrente de transferencia del vórtice, mientras que en (b) se ha establecido caos espacio-temporal [Figura 5.7].

mantiene constante

$$L_z = i\hbar \int \bar{\psi}_1 \partial_\theta \psi_1 + i\hbar \int \bar{\psi}_2 \partial_\theta \psi_2 = L_z^{(1)} + L_z^{(2)}. \quad (5.23)$$

En la Figura 5.8 representamos la evolución del momento angular total y el de cada componente $L_z^{(j)}$ para una situación de recurrencia y para una situación de caos espacio-temporal. Ambas gráficas demuestran el establecimiento de una dinámica compleja de intercambio de momento angular entre las nubes atómicas. Los estados intermedios son estados topológicamente no triviales debido a la transferencia de carga topológica. Un análisis más detallado se encuentra en [96].

5.3.5 Conclusiones

Hemos analizado la estabilidad de los vórtices en condensados de Bose–Einstein atómicos multicomponente, empleando las ecuaciones de Gross–Pitaevskii acopladas. Hemos demostrado que un vórtice en el estado $|1\rangle$ es un objeto dinámicamente estable, aunque no sea un mínimo local de la energía. Por el contrario, un vórtice en la especie $|2\rangle$ ha resultado ser una configuración inestable que tiende a ser expulsado. Por último, al despreciar todo mecanismo disipativo, nuestro modelo no puede desprenderse de la conservación del momento angular y el vórtice expulsado de la componente $|2\rangle$ experimenta una transferencia periódica entre especies. Estas y otras predicciones han recibido confirmación experimental [87, 24].

6. HIDRODINÁMICA DE CONDENSADOS

Resumen

En este capítulo estudiaremos cómo se manifiesta la superfluidez en el momento de inercia de un condensado de Bose–Einstein. Partiendo de la ecuación de campo medio en la aproximación de temperatura cero (ecuación de Gross–Pitaevskii), estudiaremos la respuesta del condensado a la rotación de la trampa que lo confina. Con hipótesis razonables encontraremos soluciones exactas para el campo de velocidades del condensado sin vórtices o con un vórtice centrado y simétrico. Demostraremos que en ambos casos el momento de inercia, y por tanto la reacción del fluido cuántico, es mucho menor que la de un fluido ordinario. Además de en el momento de inercia, la superfluidez se manifiesta en las trayectorias clásicas que se desarrollan en el condensado, pues de acuerdo con ellas los bosones apenas experimentan pequeños desplazamientos alrededor de su posición inicial. Por último contrastaremos estos resultados analíticos con simulaciones numéricas de un condensado rotante.

6.1 Condensados rotantes

En este capítulo utilizaremos la teoría de campo medio y temperatura cero para demostrar que un condensado de Bose–Einstein diluido manifiesta superfluidez en valores anómalos del momento de inercia, en flujos irrotacionales anormalmente lentos y en la existencia de corrientes circulares cuantizadas [45]. Para ello estudiaremos cómo responde el condensado a la rotación de la trampa magnética que lo confina. Supondremos que esta trampa es armónica y rota con velocidad angular uniforme, Ω , alrededor de un eje de simetría fijo. El potencial rotante que describe la trampa admite la siguiente expresión matemática

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0(e^{-\Omega t R_z} \mathbf{x}) = V_0(U(-\Omega t) \mathbf{x}). \quad (6.1)$$

$U(\theta)$ es una transformación ortogonal que gira un vector un ángulo θ alrededor del eje x_3 y la matriz R_z es el generador de las rotaciones

$$R_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

El potencial estacionario V_0 responde a una forma cuadrática definida positiva

$$V_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\omega_1^2 r_1^2 + \omega_2^2 r_2^2 + \omega_3^2 r_3^2). \quad (6.3)$$

Podemos reescribir este potencial de muchas formas. Nosotros parametrizaremos la geometría en la misma forma que (2.8)

$$V_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \omega_{\perp}^2 (1 + \varepsilon) r_1^2 + \frac{1}{2} \omega_{\perp}^2 (1 - \varepsilon) r_2^2 + \frac{1}{2} \omega_{\parallel}^2 r_3^2, \quad (6.4)$$

$$= \frac{1}{2} \omega_{\perp}^2 [(1 + \varepsilon) r_1^2 + (1 - \varepsilon) r_2^2 + \gamma r_3^2]. \quad (6.5)$$

En general asumiremos que r_3 es el eje de rotación, ε mide la deformación transversal de la trampa y γ su deformación longitudinal. Por ejemplo, cuando $\varepsilon = 0$, los valores $\gamma = 1$, $\gamma = 0.5$ y $\gamma = 2$ describen trampas con forma esférica, de cigarro y oblatas, respectivamente.

Es de esperar que en equilibrio el condensado se deforme para adaptarse y girar solidariamente con la trampa que lo confina. Puesto que esta hipótesis presidirá nuestros cálculos, necesitaremos emplear dos marcos de referencia distintos: el sistema de referencia del laboratorio, $\{S, \mathbf{x}\}$, estacionario, y el sistema de referencia rotante, $\{\tilde{S}, \mathbf{r} = U(-\Omega t)\mathbf{x}\}$, que se mueve con la trampa. Las ecuaciones resultan además más sencillas si recurrimos al sistema de unidades natural del condensado, establecido en §2.2.1 a partir de la anchura del estado fundamental lineal, $a_\perp = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$ y la masa de los bosones involucrados, m .

En el marco de referencia del laboratorio, con estas unidades, la ecuación de campo medio es la ecuación de Gross–Pitaevskii (2.15). Denotando con Δ_x el laplaciano sobre las coordenadas (x_1, x_2, x_3) tenemos

$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta_x + V(x, t) + U_0 |\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t).$$

Esta teoría tiene dos parámetros libres importantes. El primero es la velocidad angular de la trampa, Ω , que aparece embebida en el potencial, y el segundo es la fuerza de interacción efectiva entre átomos, $U = NU_0 = 4\pi Na/a_\perp$, donde el número de partículas, N , viene dado por la norma de la solución

$$N = \|\psi\|_2^2 = \int |\psi|^2 d^n x \quad (6.6)$$

Para que el funcional de energía posea un estado fundamental estable, Ω debe ser del orden de magnitud o más pequeño que el confinamiento radial del condensado, $\omega_\perp$. La auto interacción, U , tomará valores que oscilarán en este trabajo entre 0 y 6×10^4 , que representan alrededor de $10^5 - 10^6$ átomos de rubidio, por ejemplo¹.

Definiremos una segunda función de onda, esta vez sobre el marco de referencia móvil $\tilde{S}$, y que obtenemos con el cambio de variables

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \psi(U(\Omega t)\mathbf{r}, t).$$

La ecuación de evolución para esta función de onda es una ecuación de Gross–Pitaevskii modificada

$$i\partial_t \phi = \left[-\frac{1}{2} \Delta_r + V_0(\mathbf{r}) + U_0 |\phi|^2 - \Omega L_z \right] \phi, \quad (6.7)$$

en la que aparece el operador hermítico $L_z = -i\partial_\theta = -i(r_1\partial_2\phi - r_2\partial_1\phi)$, que representa la proyección del momento angular a lo largo del eje Z.

¹ Véase la Tabla 2.1 para valores relativos a experimentos con otras especies atómicas.

6.2 Estados estacionarios

La ecuación (6.7) posee una familia de soluciones que reciben la denominación de estados estacionarios², y que son el equivalente no-lineal de una ecuación de autovalores. Estas soluciones tienen un perfil de densidad constante que se mueve solidariamente con la trampa

$$\phi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t} \phi(\mathbf{r}, 0). \quad (6.8)$$

La constante μ es un número real que suele ser interpretado como la frecuencia o el potencial químico del condensado, y aparece como autovalor no lineal en una variante de la ecuación de Ginzburg–Gross–Pitaevskii

$$\mu \phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{1}{2} \Delta_r + V_0(\mathbf{r}) + U_0 |\phi|^2 - \Omega L_z \right] \phi(\mathbf{r}), \quad (6.9)$$

en la que se puede apreciar que ha desaparecido toda dependencia temporal.

Los estados estacionarios pueden interpretarse también como soluciones de un problema variacional. Recordando que existe un funcional de energía asociado a la ecuación (6.7)

$$E(\phi, N) = \int \left[\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + V_0(\mathbf{r}) |\phi|^2 + \frac{U_0}{2} |\phi|^4 - \Omega \bar{\phi} L_z \phi \right] d^n r, \quad (6.10)$$

no resulta difícil demostrar que la ecuación estacionaria (6.9) puede escribirse como

$$\frac{\partial E}{\partial \bar{\phi}} = \mu \phi, \quad (6.11)$$

lo cual es una forma de decir que cualquier estado estacionario es un punto crítico del *funcional de energía libre*,

$$\mathcal{F}_\mu = E(\phi, N) - \mu \int |\phi|^2, \quad (6.12)$$

o bien que es un punto crítico del funcional de energía sobre la superficie de norma constante (6.6). Ambos principios variacionales llevan a una tercera interpretación del parámetro μ como multiplicador de Lagrange de la norma.

6.3 Variables de Madelung

Hemos comprobado que para una clase de soluciones el módulo de la función de onda juega un papel importante. Vamos a realizar un cambio de variables en la

² Véase §2.2.4.

incógnita de las ecuaciones (2.15) y (6.7), conocido como variables de Madelung, y que consiste en separar módulo y fase en la función de onda compleja

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\nu(\mathbf{x}, t)} e^{i\xi(\mathbf{x}, t)}, \quad (6.13)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} e^{i\Theta(\mathbf{r}, t)}. \quad (6.14)$$

Esta representación tiene una interpretación física atractiva. El módulo de la función de onda, sea $\nu(\mathbf{x}, t)$ ó $\rho(\mathbf{r}, t)$, proporciona la densidad de bosones en cada punto del espacio³. La fase es un objeto puramente cuántico responsable de fenómenos interferenciales, pero también actúa como potencial para el campo de velocidades instantáneo en el condensado gaseoso. De hecho en los marco de referencia estacionario y rotante las velocidades generadas por las distribuciones de fase respectivas son

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}, t) = \text{Im}(\bar{\psi} \nabla_x \psi) = \nabla_x \xi(\mathbf{x}, t), \quad (6.15)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \nabla_r \Theta(\mathbf{r}, t). \quad (6.16)$$

Existe una relación importante que conecta ambos campos

$$\mathbf{V}(\mathbf{x}, t) = U(-\Omega t) \mathbf{v}(U(-\Omega t) \mathbf{x}, t). \quad (6.17)$$

Introduciendo las variables de Madelung en la ecuación de Gross–Pitaevskii sobre el marco de referencia estacionario (2.15)

$$\partial_t \nu = -\nabla_x \cdot [\nu \mathbf{V}] \quad (6.18)$$

y sobre el marco de referencia rotante (6.7)

$$\partial_t \rho - \Omega \nabla_r \rho \cdot (R_z \mathbf{r}) = -\nabla_x \cdot [\rho \mathbf{v}] \quad (6.19)$$

obtenemos dos variantes de la ecuación de continuidad para la densidad del fluido. Existe una segunda ecuación que conecta la distribución de fase con la densidad y que únicamente escribiremos sobre el marco de referencia rotante

$$-\partial_t \Theta = -\frac{\Delta \sqrt{\rho}}{2\sqrt{\rho}} + \frac{(\nabla \Theta)^2}{2} + V_0 + g\rho + i\Omega L_z \Theta. \quad (6.20)$$

Esta ecuación es equivalente a la ecuación de un fluido clásico salvo por la presencia de un término extraordinario, $\Delta \sqrt{\rho}/2\sqrt{\rho}$, que recibe el nombre de *presión cuántica*.

6.4 Soluciones analíticas

En lo que sigue emplearemos la representación de Madelung para obtener resultados analíticos sobre los estados estacionarios del condensado. La aproximación

³ De forma rigurosa, $\frac{1}{N} \rho(\mathbf{r}, t) d^n r$ es en realidad la distribución de probabilidad de encontrar un bosón en el volumen infinitesimal localizado sobre $\mathbf{r}$.

principal consistirá en suponer un flujo laminar e incompresible, donde las superficies de densidad constante tienen forma elíptica en cada plano $\{r_1, r_2\}$,

$$\rho = \rho(u, r_3) = \rho\left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2/a}, r_3\right), \quad (6.21a)$$

$$\Theta = \Theta(r_1, r_2). \quad (6.21b)$$

Esta hipótesis no es demasiado restrictiva y resulta exacta para el estado fundamental en ciertos límites que discutiremos más adelante. Para simplificar las expresiones que resultarán necesitaremos un parámetro que denominaremos coeficiente normalizado de anisotropía

$$k = (1 - a)/(1 + a) \in [-1, +1]. \quad (6.22)$$

Este factor está relacionado con las anchuras cuadráticas medias de la nube atómica en las direcciones r_1 y r_2

$$k = \frac{\langle r_2^2 \rangle - \langle r_1^2 \rangle}{\langle r_1^2 \rangle + \langle r_2^2 \rangle}, \quad (6.23)$$

y se corresponde con el parámetro $\tilde{\alpha}$ empleado en los últimos resultados experimentales de la ENS [80].

Utilizando la ecuación de continuidad sobre el marco de referencia rotante (6.19) y la aproximación de flujo laminar (6.21), encontramos una ecuación para la fase

$$h(u) [\Omega (1 - a) r_1 r_2 + a r_1 \partial_1 + r_2 \partial_2] \Theta = \Delta \Theta, \quad (6.24)$$

donde $h = d \ln \rho / d(u^2)$.

Buscamos soluciones correspondientes a un flujo incompresible, $\Delta \Theta = 0$, de manera que el campo de velocidades debe cumplir la siguiente ecuación en derivadas parciales

$$\Omega [(1 - a) r_1 r_2] + [a r_1 \partial_1 + r_2 \partial_2] \Theta = 0. \quad (6.25)$$

Esta ecuación tiene soluciones exactas de la forma

$$\Theta(\mathbf{r}, t) = -\mu t + \Omega \frac{a-1}{a+1} r_1 r_2 + \Theta_{vort}(\mathbf{r}), \quad (6.26)$$

donde aparece una contribución desconocida en la fase, Θ_{vort} , y que implica un flujo incompresible, $\Delta \Theta_{vort} = 0$, sobre las superficies elípticas de densidad constante, $\nabla \Theta_{vort} \perp \nabla \rho$.

Definiendo la carga topológica como la integral de línea

$$m = \frac{1}{2\pi} \oint \nabla \Theta \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \oint \nabla \Theta_{vort} \cdot d\mathbf{r}, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (6.27)$$

resulta evidente que esta integral es algún múltiplo entero de 2π y que por tanto el término Θ_{vort} es el responsable de la vorticidad, en caso de que exista alguna.

Debemos resaltar que si fijamos el valor de Θ_{vort} , la distribución de densidad puede obtenerse resolviendo la versión estacionaria de la ecuación (6.20)

$$\mu = -\frac{\Delta\sqrt{\rho}}{2\sqrt{\rho}} + \frac{(\nabla\Theta)^2}{2} + V_0 + g\rho + i\Omega L_z\Theta. \quad (6.28)$$

Como demostraremos en la siguiente sección, la solución de esta ecuación es particularmente sencilla en los límites de gas ideal, $U_0N \rightarrow 0$, y en el límite de Thomas–Fermi, $U_0N \rightarrow \infty$.

6.5 Superfluidez sin vórtices

Para obtener soluciones estacionarias sin vorticidad basta tomar $\Theta_{vort} = 0$ en la ecuación (6.26)

$$\Theta = -\mu t + \Omega \frac{a-1}{a+1} r_1 r_2. \quad (6.29)$$

Como era de esperar, en el caso radialmente simétrico, $a = 1$, recuperamos soluciones radialmente simétricas donde la fase es uniforme y el campo de velocidades se anula.

En trampas asimétricas, sin embargo, el campo de velocidades es distinto de cero a la vez que irrotacional, $\nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{V} = 0$. Empleando la definición (6.15) del campo de velocidades sobre el sistema de referencia estacionario, $\mathbf{V}$, podemos obtener expresiones analíticas para el flujo del condensado en el laboratorio

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{V}(\mathbf{x}, t), \quad (6.30)$$

y sobre la trampa

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t). \quad (6.31)$$

Este flujo es el producto de dos rotaciones alrededor del eje Z: una rotación con velocidad angular Ω y un desplazamiento sobre una elipse con velocidad angular ligeramente inferior $\omega = -\Omega\sqrt{1-k^2}$... ¡en sentido contrario! Este resultado sorprendente tiene dos consecuencias importantes. En primer lugar, sobre el sistema de referencia móvil $\tilde{S}$ el fluido se mueve sobre líneas elípticas oponiéndose al sentido de giro de la trampa con una velocidad ligeramente inferior [Figura 6.5(d)]. En segundo lugar e igual de importante, la composición de ambos movimientos da lugar a trayectorias elípticas abiertas sobre el sistema de referencia del laboratorio con una velocidad muy pequeña [Figura 6.5(c)].

A grandes rasgos, la primera señal de superfluidez la encontramos en el flujo lento y espiralado que tiene lugar en el laboratorio. Este flujo lento da lugar a un

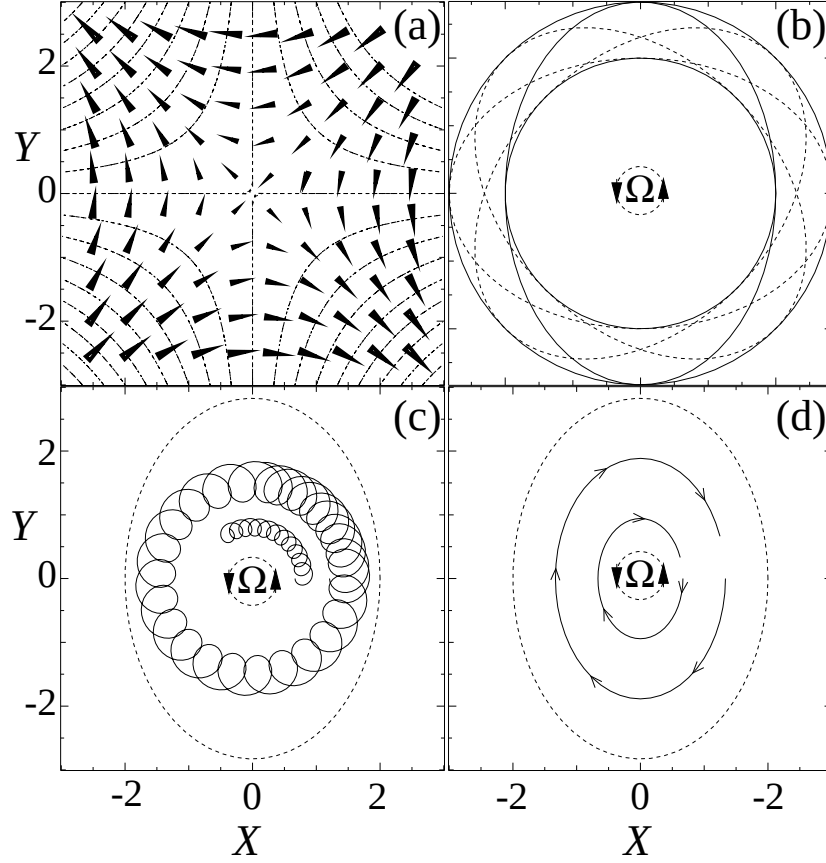


Fig. 6.1: Características del flujo de un condensado asimétrico sin vórtices con factor de forma $a \simeq 2$ y velocidad de rotación $\Omega = 1$. (a) Campo de velocidades en el instante inicial, $t = 0$, sobre el laboratorio. (b) La geometría elíptica del condensado asimétrico define dos círculos concéntricos cuyos radios determinan la anchura del flujo espiral que tiene lugar en el laboratorio. (c) Líneas de flujo sobre el laboratorio: mostramos la forma de la nube (línea de trazos) en el límite de Tomas–Fermi y la evolución de dos partículas semiclásicas – las espirales interiores para 6 rotaciones de la trampa y las exteriores para 20 periodos de rotación (El periodo es $2\pi/\Omega$). (d) Flujo en el sistema de referencia rotante para las partículas de (c) pero sólo durante un periodo: naturalmente, el flujo se opone al giro de la trampa.

momento de inercia y un momento angular inferiores a los propios de un fluido normal con el mismo perfil de densidad. Recordando la definición del momento angular encontramos el siguiente valor

$$\langle L_z \rangle_{ground} = \int \rho (r \times \nabla \Theta)_z = \Omega \frac{\langle r_1^2 - r_2^2 \rangle^2}{\langle r_1^2 + r_2^2 \rangle}, \quad (6.32)$$

construido a partir de $a = \langle r_1^2 \rangle / \langle r_2^2 \rangle$. Como esperábamos, el momento de inercia

$$I = \frac{1}{\Omega} \langle L_z \rangle = \frac{\langle r_1^2 - r_2^2 \rangle^2}{\langle r_1^2 + r_2^2 \rangle},$$

es significativamente inferior al valor clásico típico de un fluido normal y de un sólido rígido,

$$I_{normal} = \langle r_1^2 + r_2^2 \rangle.$$

De hecho este valor se anula completamente para trampas simétricas, donde el condensado no experimenta ninguna respuesta mecánica al giro de la trampa. Finalmente hemos de señalar que la ecuación (6.32) difiere del límite de temperatura cero obtenido por otros autores [122] puesto que nuestro resultado no obedece a desarrollos perturbativos y además permite que la forma del condensado dependa de la velocidad de rotación.

Combinando las ecuaciones (6.29) y (6.7) encontramos una ecuación de tipo Schrödinger no-lineal para la distribución de densidad,

$$\mu \sqrt{\rho(\mathbf{r})} = \left[-\frac{1}{2} \Delta_r + \tilde{V}_0(\mathbf{r}) + U_0 \rho + i \Omega L_z \right] \sqrt{\rho(\mathbf{r})}, \quad (6.33)$$

donde el potencial efectivo es armónico

$$\tilde{V}_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \omega_{1,eff}^2 r_1^2 + \frac{1}{2} \omega_{2,eff}^2 r_2^2 + \frac{1}{2} \omega_3^2 r_3^2,$$

con una pareja de frecuencias que dependen de la velocidad de rotación

$$\omega_{x,eff}^2 = \omega_1^2 + \Omega^2 k(k-2), \quad (6.34a)$$

$$\omega_{y,eff}^2 = \omega_2^2 + \Omega^2 k(k+2). \quad (6.34b)$$

Podemos calcular de forma autoconsistente la asimetría de la nube condensada en dos límites importantes: el límite sin interacción, ideal o lineal, $U_0 N \rightarrow 0$, y el límite de Thomas–Fermi, $U_0 N \rightarrow \infty$. Ambas soluciones son

$$a_L = a(g \rightarrow 0) = \omega_{x,eff} / \omega_{y,eff}, \quad (6.35a)$$

$$a_{TF} = a(g \rightarrow \infty) = (\omega_{x,eff} / \omega_{y,eff})^2. \quad (6.35b)$$

Estas expresiones representan en realidad ecuaciones auto-consistentes para el perfil del condensado,

$$\frac{1 - k_{TF}}{1 + k_{TF}} = \frac{\omega_1^2 + \Omega^2 k_{TF}(k_{TF} - 2)}{\omega_2^2 + \Omega^2 k_{TF}(k_{TF} + 2)} \quad (6.36)$$

con hasta tres soluciones distintas de las cuales sólo una se corresponde a la situación de mínima energía [107].

Incluso sin resolver estas ecuaciones resulta evidente de (6.34) y (6.35) que la rotación enfatiza la anisotropía. En las Figuras 6.7(c-d) comparamos los límites lineal y de Thomas–Fermi en una trampa anisótropa concreta. La conclusión principal es que la ecuación (6.35)(b) funciona muy bien para valores realistas del número de átomos, N . Encontramos, no obstante, un pequeño error en las aproximaciones teóricas. Este error depende de la norma de la solución y está relacionado con que el hecho de que la aproximación de Thomas–Fermi elimine toda dependencia de la forma de la nube respecto del número de partículas, N .

6.6 Nucleación del primer vórtice

A medida que incrementamos la velocidad de rotación la deformación transversal deja de ser una forma eficiente para asimilar momento angular y el condensado evoluciona a diferentes estados que involucran uno o más vórtices. Desde el punto de vista matemático la fase Θ_{vortex} experimenta una discontinuidad alrededor de cualquier contorno cerrado que contenga una línea de vórtice. Desde el punto de vista práctico los vórtices surgen como líneas densidad cero ubicadas sobre las singularidades de la solución particular Θ_{vortex} que anteriormente despreciamos. Alrededor del vórtice el campo de velocidades da lugar a un flujo que no es irrotacional —esto es, viola la definición de Landau de superfluidez—, pero que en su lugar satisface la condición de Feynmann para la cuantización del flujo superfluido (6.27)

$$\oint \nabla \Theta_{vortex} \cdot d\mathbf{r} = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Si siguiendo con el razonamiento expuesto en este capítulo, deberíamos resolver la ecuación de Poisson para Θ_{vortex} con restricciones laminares sobre $\nabla \Theta_{vortex}$ y condiciones de contorno apropiadas. En lugar de proceder de esta forma aplicaremos la intuición física para obtener resultados sobre el valor esperado del momento angular. Recordemos en primer lugar la hipótesis (6.21) de que la densidad se distribuye sobre perfiles elípticos. En coordenadas polares elípticas, $\{r_1 = u \cos \theta, r_2 = \sqrt{a} u \sin \theta\}$, el gradiente de la fase debe ser de la siguiente forma

$$\nabla \Theta_{vortex} \simeq g(u) (-\sin \theta, \sqrt{a} \cos \theta), \quad (6.37)$$

donde $g(u)$ es una función decreciente del radio, u . Podemos integrar esta expresión alrededor de una elipse cualquiera para obtener la dependencia de la fase respecto del ángulo elíptico, θ ,

$$\Theta_{vortex}(\theta) \simeq m\theta + m \frac{a-1}{2(a+1)} \sin 2\theta. \quad (6.38)$$

En esta expresión encontramos la dependencia típica de un vórtice simétrico, $m\theta$, más una corrección que surge de la deformación transversal.

A partir de la ecuación (6.38) estimamos un nuevo valor del momento angular, que ahora tiene dos contribuciones, una proveniente de la la rotación de la nube y otra propia del vórtice,

$$\langle L_z \rangle = \Omega \frac{\langle r_1^2 - r_2^2 \rangle^2}{\langle r_1^2 + r_2^2 \rangle} + \frac{2m\sqrt{\langle r_1^2 \rangle \langle r_2^2 \rangle}}{\langle r_1^2 + r_2^2 \rangle} N. \quad (6.39)$$

En la trampa radialmente simétrica, $\varepsilon = 0$, la introducción del vórtice implica el cambio en una unidad del momento angular por partícula,

$$\Delta L_z = \langle L_z \rangle_{\text{vortex}} - \langle L_z \rangle_{\text{ground}} = N.$$

La asimetría, $\varepsilon \neq 0$, cambia radicalmente este resultado y cuanto más deformada la trampa, menos relevante la cantidad de momento angular almacenada por el vórtice. De hecho en el límite de trampas muy deformadas el coste de generar un vórtice es nulo

$$\lim_{|k| \rightarrow 1} \Delta L_z = 0.$$

6.7 Simulaciones numéricas

Hasta ahora hemos trabajado con una aproximación (6.21) intuitivamente agradable, pero que podría no responder a los estados físicamente realizables. Ante la carencia de medidas directas de los momentos de inercia de un condensado⁴, en este apartado contrastaremos las predicciones analíticas con soluciones numéricas de la ecuación de Gross–Pitaevskii para un condensado bidimensional.

Recordemos que las soluciones estacionarias de la ecuación (6.7) son puntos críticos del funcional [44]

$$E[\phi] = \int \bar{\phi} \left(-\frac{1}{2} \Delta_r + V_0(r) + \frac{g}{2} |\phi|^2 - \Omega L_z \right) \phi, \quad (6.40)$$

sujeto a la hipersuperficie de norma constante $\int |\phi|^2 d^n r = N$. Alguno de estos puntos críticos corresponden a estados fundamentales del condensado, configuraciones de mínima energía que adopta el superfluido en la trampa rotante.

Para encontrar estos estados fundamentales hemos minimizado el funcional (6.40) aplicando el método de gradientes de Sobolev sobre una base de Fourier discreta (Véase §10.4). Los resultados que presentamos se han obtenido para (i) una trampa bidimensional radialmente simétrica, $\omega_1 = \omega_2$, $\varepsilon = 0$, (ii) una trampa

⁴ Esto no es del todo cierto, pues existen medidas experimentales de momentos de inercia [22]; sin embargo estos valores se han obtenido en un régimen de rotación que involucra anisotropías extremas y un número considerable de vórtices deformados, alejados del tipo de flujo que estamos estudiando.

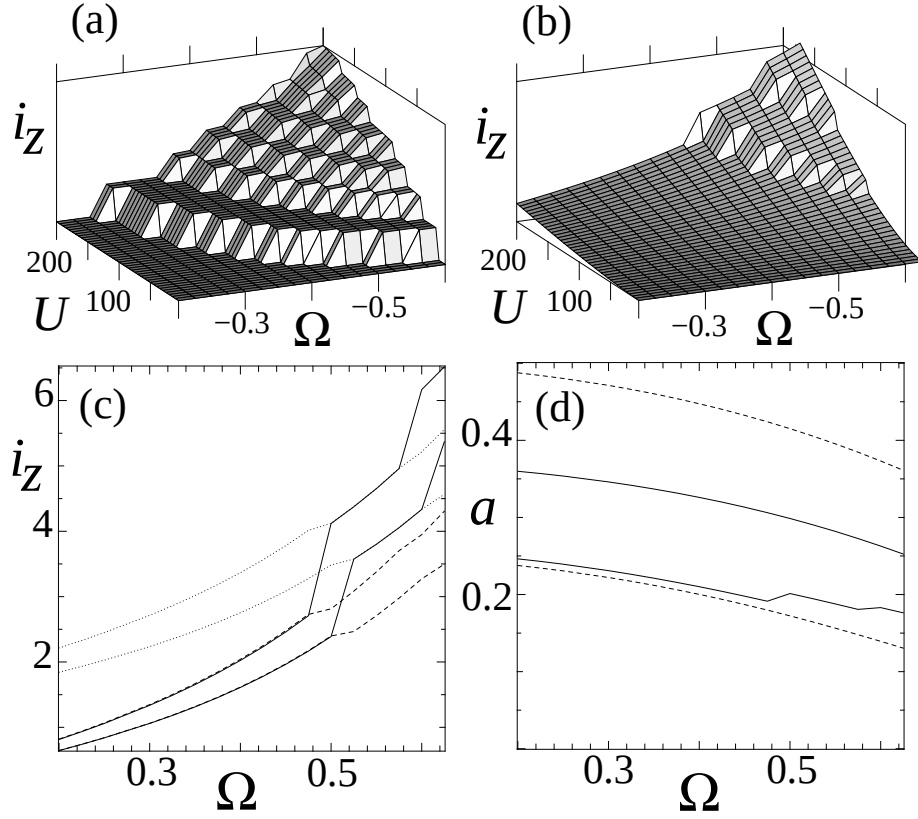


Fig. 6.2: (a-b) Evolución del momento de inercia por partícula $i_z = L_z/N\Omega$ en función de la frecuencia de rotación y el número de átomos en el condensado para (a) una trampa con simetría radial y (b) una trampa asimétrica con $\omega_2^2 = 2\omega_1^2$. (c) Momento de inercia frente a velocidad angular para la trampa asimétrica (línea sólida), estimación para un estado sin vorticidad (línea de puntos) y estimación para un único vórtice centrado (línea de trazos). (d) Asimetría de la nube atómica, a , en la trampa asimétrica. Mostramos la predicción teórica en el límite de Thomas-Fermi (línea de puntos inferior) y en el límite lineal (línea de puntos superior), junto con los resultados numéricos para $N = 5$ (línea sólida superior) y $N = 175$ (línea sólida inferior). Todas las magnitudes son adimensionales.

bidimensional sin simetría, $\omega_1 = \sqrt{2}\omega_2$ y (iii) un condensado tridimensional oblató que gira alrededor de uno de sus ejes mayores, $\omega_1 = \omega_3 = \sqrt{2}\omega_2$. Utilizando estas configuraciones exploramos el espacio de parámetros libres $\{\Omega, U = Ng\}$, obteniendo mapas que muestran el momento angular del estado fundamental como función de las condiciones de rotación y que se muestran en las Figuras 6.7(a-b) 6.3(a).

El conjunto de las dos primeras simulaciones [Figura 6.7] corresponde a modelos bidimensionales que describen condensados con forma extremadamente oblata que rotan alrededor del eje de simetría menor ($\omega_1, \omega_2 \ll \omega_3 \rightarrow \infty$). Dependiendo del tipo de aproximación utilizada para llegar al modelo bidimensional existirá una relación diferente entre las constantes U , g y N . Como este tipo de reducciones son aun fuente de controversia, ofrecemos los resultados de explorar un rango de auto-interacciones amplio, capaz de abarcar los órdenes de magnitud físicamente relevantes.

El último juego de simulaciones [Figura 6.3] es de naturaleza completamente tridimensional. En ellos estudiamos de nuevo una trampa oblata, solo que ahora el eje de rotación r_2 está situado de forma ortogonal al eje de simetría r_3 . Hemos escogido este tipo de configuraciones por tratarse de un sistema poco estudiado en la literatura y que sin embargo aparece en algunos experimentos prometedores del grupo de Oxford [85].

En la Figura 6.7(a) presentamos las propiedades rotacionales de un condensado bidimensional radialmente simétrico sometido a diferentes velocidades de rotación. Como era de esperar [16], el momento de inercia se mantiene constante e igual a cero hasta alcanzar una velocidad crítica, $\Omega_1(N)$, donde tiene lugar la nucleación del primer vórtice. A partir de aquí el momento de inercia se mantiene de nuevo constante e igual a $I_z = N$, hasta alcanzar una segunda frecuencia crítica donde se genera una segunda línea de vórtice. Entonces la evolución es creciente y diferenciable a trozos debido a que los vórtices pueden moverse para acomodar más momento angular según incrementamos la rotación.

En la Figuras 6.7(b) y 6.3(a) mostramos la evolución del momento de inercia del condensado bidimensional y tridimensional en el seno de trampas asimétricas — $\varepsilon \neq 0$ —. Ahora el momento de inercia manifiesta una dependencia no trivial respecto del número de partículas y la velocidad angular. Es distinto de cero para el condensado sin vórtices y deja de ser constante cuando se genera el primer vórtice. En ambos casos el momento de inercia I_z (Figuras 6.7(c) y 6.3(b)) está bien aproximado por las ecuaciones (6.32) y (6.39), lo que sugiere que ambas fórmulas son de hecho exactas y las hipótesis (6.21) razonables.

Debemos resaltar que en la figura 6.3(b) la contribución del vórtice al momento angular total es menos de la mitad del valor habitualmente empleado. Por tanto la expresión (6.39) debe ser de particular importancia a la hora de interpretar las medidas indirectas del momento angular en experimentos con trampas muy deformadas [85, 80].

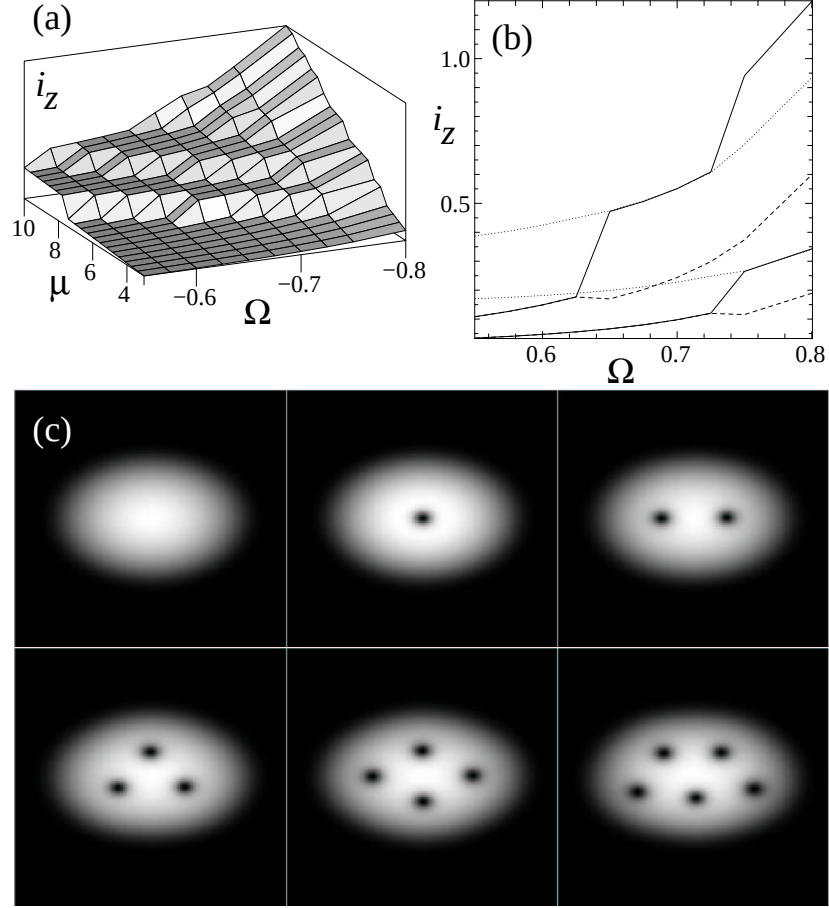


Fig. 6.3: (a) Evolución del momento de inercia por partícula $i_z = L_z/N\Omega$ en función de la velocidad angular de la trampa y del potencial químico μ . Estudiamos una trampa tridimensional que gira alrededor de uno de los ejes mayores del condensado $\omega_2^2 = 2\omega_1^2 = 2\omega_3^2$, y un condensado con alta autointeracción $U = 3000$. (b) Momento de inercia frente a la velocidad angular de la trama asimétrica (línea continua), estimación para un estado sin vórtices (línea de puntos) y estimación para un estado con un único vórtice (línea de trazos). (c) Diferentes vistas superiores de los estados fundamentales para valores crecientes de la velocidad angular.

6.8 Conclusiones

En este capítulo hemos demostrado cómo obtener información precisa sobre las propiedades macroscópicas de un condensado rotante. Empleando aproximaciones físicas plausibles (flujo laminar e incompresible) hemos derivado expresiones para el campo de velocidades del condensado, las líneas de corriente, el momento angular y el momento de inercia.

Hemos demostrado que un condensado sin vórtices se mueve siguiendo caminos espiralados y oponiéndose a la acción mecánica de la trampa rotante. Hemos caracterizado la intensidad de este flujo por medio del momento de inercia, encontrando un valor significativamente menor que la predicción para un fluido ordinario. Ambos resultados representan trazas de la superfluidez del condensado (Ver el Capítulo 2).

A continuación repetimos estos cálculos para un condensado que alberga un vórtice centrado de carga arbitraria, obteniendo una relación no-trivial entre las dimensiones del condensado y la contribución del vórtice al momento angular de la nube.

Por último hemos confirmado nuestras predicciones minimizando el funcional de energía (6.40) para una extensa gama de los parámetros libres (Ω, N) y diferentes dimensionalidades y geometrías del condensado. Así hemos demostrado que la hipótesis de flujo laminar es razonable y que en los casos con uno o ningún vórtice las leyes (6.39) y (6.32) representan estimaciones precisas del momento angular.

Precisamente las fórmulas (6.32) y (6.39) representan una mejora considerable sobre las obtenidas por otros autores [122] a partir de un tratamiento perturbativo que sólo es válido en el límite $U = Ng \rightarrow 0$ y que además no considera posibles deformaciones de la nube de átomos.

Los resultados de este capítulo se han revelado de interés en experimentos recientes [80], realizados durante la redacción de esta tesis, y que estudian la transición de un estado sin vorticidad a un estado con vorticidad $m = 1$. En estos experimentos se confirma la existencia de soluciones estables con asimetrías crecientes, que responden a la ecuación (6.35), y se confirma la existencia de estados inestables correspondientes a las soluciones supercríticas de (6.35).

Consideramos que los métodos desarrollados en este capítulo son susceptibles de mejora y generalización y que pueden constituir la base de trabajo futuro en relación con la estabilidad de vórtices, el estudio de su forma e incluso estimaciones variacionales de la energía en la transición entre estados.

Parte II

ONDAS DE LUZ

7. SOLITONES DIPOLARES EN MEDIOS SATURABLES

Resumen

En este capítulo encontramos un nuevo tipo de solitón vectorial en sistemas de naturaleza óptica. Estos solitones, que surgen de la captura de un modo dipolar por una guía de onda inducida mediante solitones, son más estables que el conocido solitón vectorial de tipo vórtice y representan una nueva clase de objetos no lineales extremadamente robustos.

En la segunda parte del capítulo estudiamos las propiedades de scattering de estos dipolos. Demostramos que estos objetos autoatrapados carentes de simetría se comportan como “*moléculas de luz*”, capaces de sobrevivir a múltiples tipos de colisiones, exhibiendo fenómenos como la conversión de momento lineal en momento angular, absorción de solitones, fusión y fisión, recombinación de solitones, etc.

La existencia y la estabilidad de los solitones dipolares han sido confirmados experimentalmente [76], resultados que presentaremos al final de la exposición.

7.1 Introducción

Quizás uno de los objetivos más deseables en Óptica consiste en el desarrollo de dispositivos puramente ópticos, en los que la luz sea capaz de guiar y manipular a la luz misma. Esta motivación subyace al creciente interés en tres objetos hechos de luz. En primer lugar está los haces de luz autoatrapados o *solitones ópticos espaciales*, capaces de propagarse grandes distancias sin distorsión a través de medios materiales con respuesta no lineal, y capaces de interactuar entre sí [118]. En segundo lugar encontramos las guías de onda inducidas, donde un haz de luz coherente y un medio no lineal son capaces de confinar y dirigir una segunda señal. Por último, cuando la guía inducida y el haz guiado son ambos de naturaleza solitónica y completamente distinguibles¹, nos encontramos con un nuevo objeto, el *solitón vectorial* [23] cuya estructura interna y propiedades dinámicas dan lugar a resultados sorprendentes de estabilidad incluso en los problemas más sencillos.

Los fenómenos originados por la naturaleza vectorial de las ecuaciones de onda no lineales aparecen en muy diversos campos de la Física y son habituales en el contexto de la Física de la Materia Condensada, dinámica de biomoléculas, Óptica no lineal, etc. No obstante, estas estructuras complejas han surgido con renovado interés en campos experimentales de candente actualidad. Una primera familia importante son los medios ópticos activos de naturaleza vectorial, que están siendo investigados por las posibilidades que ofrecen frente a medios escalares, [109, 60, 61]. Otros ejemplos importantes lo encontramos en condensados de Bose–Einstein multicomponente, sistemas que ya han sido estudiados en el Capítulo 5.

En este capítulo estudiaremos un tercer objeto vectorial formado por dos haces ópticos que interactúan incoherentemente en un medio no lineal saturable. Para comprender este sistema recordemos que, cuando la interacción con el medio es autofocalizante, un haz de luz aislado puede formar un estado autoatrapado o

¹ Por ejemplo, pueden tener distinta polarización o distinta frecuencia

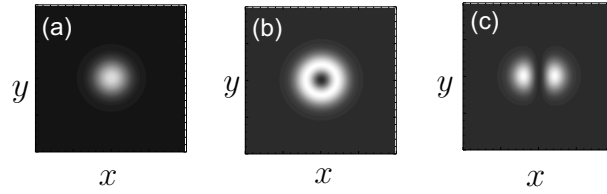


Fig. 7.1: Distribución de intensidad de modos (a) fundamental, (b) vórtice y (c) dipolar guiados por un solitón radialmente simétrico.

solitón espacial [118]. Este solitón modifica el índice de refracción del medio sobre el que se propaga y crea por tanto una guía de onda efectiva, que puede confinar un segundo haz de luz de menor intensidad.

Según la teoría lineal de guía de ondas, esperamos que un primer haz radialmente simétrico pueda guiar distintos modos con geometrías complicadas [Figuras 7.1]. Para mayores intensidades del segundo haz esta suposición intuitiva deja de ser válida, pues ahora el “haz guiado” es susceptible de modificar las propiedades del medio e interactuar con el “haz guía”. Gracias a esta *interacción mediada por el material*, ambos objetos de luz dejan de ser entidades independientes para formar un *solitón vectorial*. Las formas de ambos haces dejan de ser independientes y resulta imposible determinar a priori qué geometrías son aceptables para el sistema y cuáles no.

No obstante, recordando trabajos anteriores con solitones unidimensionales de dos componentes [93], donde se alcanzan configuraciones estables multinodales, es de esperar que el solitón vectorial adopte al menos dos configuraciones posibles. La primera generalización del resultado unidimensional es el *solitón vectorial de tipo vórtice* [90, 83] donde la primera componente carece de nodos [Ver Figura 7.1(a)] y la segunda componente forma un vórtice [Figura 7.1(b)]. La segunda alternativa que presentamos aquí es lo que llamamos *solitón vectorial tipo dipolo*, donde la primera componente mantiene la misma forma [Figura 7.1(a)] y la segunda forma una línea de ceros en alguna dirección [Figura 7.1(c)].

Este capítulo consta de dos partes. En la primera discutimos la estabilidad del solitón vectorial tipo vórtice, demostrando que es un objeto *linealmente inestable* y degenera en solitones tipo dipolo [50, 76]. Resolviendo las ecuaciones de Schrödinger no lineales acopladas que rigen el sistema (7.1), probamos que el dipolo existe para todo tipo de proporciones en las intensidades de cada componente y que en todos estos rangos es estable bajo perturbaciones de pequeña y gran amplitud, exhibiendo en el peor de los casos una dinámica similar a los haces en espiral [15].

En la segunda parte establecemos una analogía entre el dipolo y una molécula de luz. Partiendo de esta hipótesis analizamos las colisiones de un solitón escalar contra un dipolo en reposo y de dos dipolos entre sí. En este estudio encontramos una serie de efectos interesantes que caracterizan las interacciones de estos objetos: absorción de un solitón por un dipolo, reemplazo de una de las componentes

del dipolo por un solitón entrante, transformación de momento lineal en momento angular resultando en un dipolo rotante, etc. Finalmente incluimos resultados experimentales de trabajos con cristales fotorefractivos que verifican la existencia y estabilidad del dipolo vectorial y un ejemplo de colisión.

7.2 Existencia y estabilidad de solitones vectoriales

7.2.1 Las ecuaciones

Vamos a estudiar la propagación de dos haces de luz coherente que interactúan entre sí de forma incoherente por mediación del material en el que se propagan, una sustancia con no-linealidad óptica saturable. Este modelo corresponde, en la aproximación isotrópa, a los solitones realizados experimentalmente en materiales fotorefractivos. Denotando por z la dirección de propagación de la luz en el material, y con E_1 y E_2 la envolvente de cada haz de luz, llegamos a unas ecuaciones dinámicas normalizadas

$$i \frac{\partial E_{1,2}}{\partial z} + \Delta_{\perp} E_{1,2} + \frac{E_{1,2}}{1 + |E_1|^2 + |E_2|^2} = 0. \quad (7.1)$$

El operador $\Delta_{\perp}$ es el laplaciano bidimensional que actúa sobre las coordenadas transversas a la dirección de propagación del haz.

Podemos encontrar soluciones estacionarias de las ecuaciones (7.1) de la forma

$$E_1(\mathbf{x}) = \sqrt{\beta_1} u(x, y) e^{i\beta_1 z} \quad (7.2a)$$

$$E_2(\mathbf{x}) = \sqrt{\beta_2} v(x, y) e^{i\beta_2 z} \quad (7.2b)$$

donde β_1 y β_2 son dos constantes de propagación independientes. Midiendo las coordenadas transversas en unidades de $\sqrt{\beta_1}$ e introduciendo el cociente entre las constantes de propagación, $\lambda = (1 - \beta_2)/(1 - \beta_1)$, pasamos de (7.1) a un sistema de ecuaciones estacionarias para las envolventes u y v :

$$\Delta_{\perp} u - u + \frac{u}{1 + s(u^2 + v^2)} = 0, \quad (7.3a)$$

$$\Delta_{\perp} v - \lambda v + \frac{v}{1 + s(u^2 + v^2)} = 0. \quad (7.3b)$$

La constante $s = 1 - \beta_1$ es el parámetro de la saturabilidad del medio. El límite de $s = 0$ equivale a una no-linealidad tipo Kerr, mientras que nosotros trabajaremos en un régimen intermedio fijando $s = 0.5$.

7.2.2 Solitones vectoriales de tipo vórtice

El primer tipo de solitón vectorial que estudiaremos consiste en una pareja de soluciones con simetría radial en la que la segunda componente posee una carga

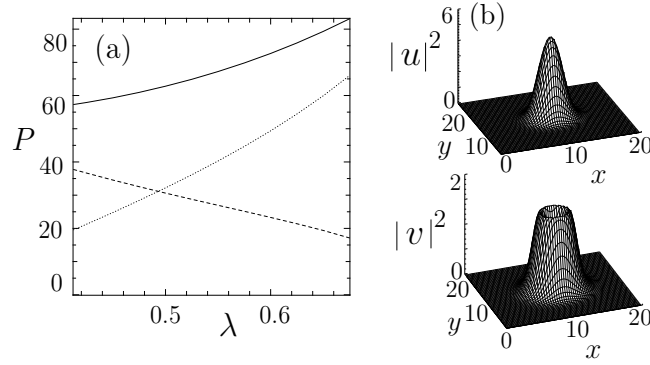


Fig. 7.2: (a) Diagrama de potencia del solitón vectorial tipo vórtice para $s = 0.5$: representamos la intensidad total (línea continua), y las intensidades de la primera componente (P_u , línea de trazos), y de la segunda componente (P_v , línea de puntos). (b) Distribución espacial de la intensidad para la primera componente (u , arriba) y para la segunda (v , abajo), en el caso particular de $\lambda = 0.65$.

topológica, m , distinta de cero

$$u(x, y) = u(r), \quad (7.4a)$$

$$v(x, y) = v(r) e^{im\phi}. \quad (7.4b)$$

Con este ansatz las ecuaciones estacionarias (7.3) adoptan la siguiente forma

$$\Delta_r u - u + \frac{u}{1 + s(u^2 + v^2)} = 0, \quad (7.5a)$$

$$\Delta_r v - (m^2/r^2)v - \lambda v + \frac{v}{1 + s(u^2 + v^2)} = 0, \quad (7.5b)$$

donde el laplaciano en coordenadas radiales es $\Delta_r = (1/r)(d/dr)(rd/dr)$.

Las soluciones fundamentales, con $m = 0$ y perfiles de intensidad gaussianos en cada haz, sólo existen para un valor concreto de $\lambda = 1$. En el resto del espacio de parámetros (s, λ) existen regiones extensas donde la segunda componente alberga un vórtice de carga unidad, $m = \pm 1$. Este tipo de soluciones ha sido extensamente investigado en las referencias [83] y [90], para la conocida como no-linealidad límite. Fijado un valor de la saturabilidad, sólo existen soluciones autoatrapadas por encima de un autovalor crítico, $\lambda > \lambda_c$. Cerca de la línea de transición $\lambda_c(s)$, la primera componente presenta un perfil gaussiano de mucha mayor intensidad que el vórtice y el conjunto actúa como una guía de ondas efectiva, desacoplándose. Lejos de este límite, la amplitud del vórtice, v , crece y adquiere una forma de anillo que captura a la primera componente. En la Figura 7.2(b) mostramos un ejemplo de tal distribución.

Las características más importantes de un solitón vectorial de tipo vórtice son

la intensidad de cada componente, P_u y P_v , y la intensidad total, $P = P_u + P_v$,

$$P_u = 2\pi \int_0^\infty |u|^2 r dr, \quad (7.6a)$$

$$P_v = 2\pi \int_0^\infty |v|^2 r dr. \quad (7.6b)$$

Tanto P_u como P_v son integrales de movimiento del modelo (7.1), y fijado el parámetro s , su dependencia respecto del autovalor $P_{u,v}(\lambda)$ caracteriza completamente la familia de solitones [Véase la Figura 7.2(a)].

7.2.3 Estabilidad del vórtice vectorial

Es un hecho conocido que existen solitones vectoriales con distribuciones de intensidad complejas, que son estables en 1+1 dimensiones [93]. El solitón vectorial de tipo vórtice que acabamos de encontrar no es sino una generalización de esas configuraciones a un entorno de (2+1) dimensiones. Resulta por tanto tentador suponer que, al igual que sus hermanos de baja dimensionalidad, el solitón con vorticidad deber ser un objeto estable.

Para demostrar que este razonamiento es erróneo hemos realizado un análisis de estabilidad lineal del solitón vectorial con vorticidad. La técnica empleada consiste en simular numéricamente las ecuaciones de evolución (7.1) una vez linealizadas alrededor de la solución con vorticidad, escogiendo un conjunto aleatorio de perturbaciones iniciales, y utilizando una técnica de integración basada en modos de Fourier [116]. Si el vórtice vectorial es estable, la solución de estas ecuaciones lineales será una combinación de modos con frecuencias reales, lo que dará lugar a simulaciones continuamente oscilantes, sin límite bien definido. Sin embargo si hay algún tipo de inestabilidad, encontraremos modos asociados a autovalores complejos, $\mu = a + ib$. En este caso las simulaciones convergerán típicamente al subespacio invariante del autovalor más inestable.

Este análisis de estabilidad rudimentario, pero efectivo, ha demostrado que pese al efecto estabilizador de la saturación [83], todos los solitones vectoriales de tipo vórtice son *linealmente inestables*. En la Figura 7.3(a) representamos la dependencia del autovalor μ del modo más inestable para distintos valores del parámetro λ fijado el tipo de saturación. Como se puede apreciar, el exponente de crecimiento de la inestabilidad tiende a cero en el punto de corte λ_c [Comparar con Figura 7.2(a)], donde la intensidad del vórtice tiende a cero, $v \rightarrow 0$. Este comportamiento es consistente con la estabilidad inherente del solitón escalar en un medio saturable. Para valores superiores de λ , la inestabilidad de las soluciones crece con la intensidad de haz que alberga el vórtice.

En las Figuras 7.3(a-b) comparamos el análisis de estabilidad lineal con simulaciones de un solitón tipo vórtice perturbado con ruido aleatorio. Las ecuaciones completas (7.1) nos muestran cómo la inestabilidad, aunque retrasada por la saturación, activa la fractura del vórtice en una estructura dipolar incluso para pequeñas

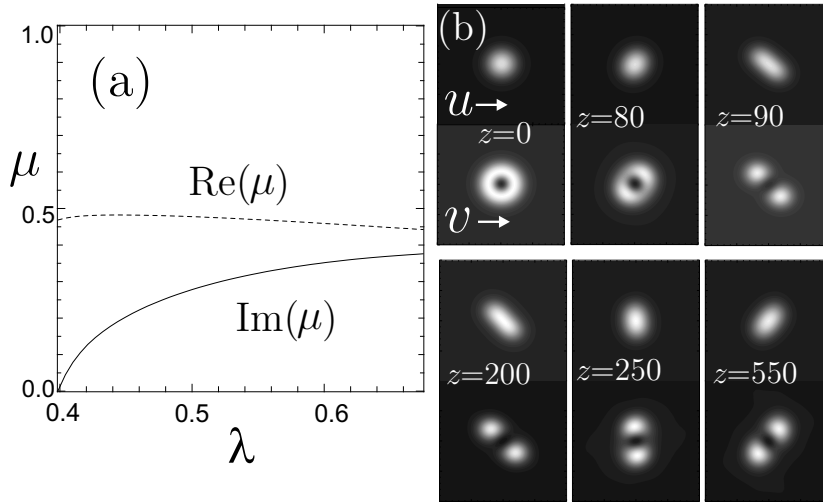


Fig. 7.3: (a) Autovalor del modo más inestable para soluciones con vorticidad ($s = 0.5$). (b) Ejemplo de la evolución de un solitón vectorial de tipo vórtice ($s = 0.65$, $\lambda = 0.6$) ligeramente perturbado. Se representan las distribuciones de intensidad de las componentes u y v en el plano transversal a la propagación [$-10 < (x, y) < 10$].

contribuciones del modo guiado, v . La estructura resultante persiste en las simulaciones con la forma de un estado rotante que emite radiación, a la manera de un *pulsar*.

7.2.4 Solitones vectoriales tipo dipolo

Los resultados del análisis anterior nos llevan a pensar que un solitón vectorial de tipo dipolo podría ser más estable que el vórtice. Motivados por esta idea hemos resuelto numéricamente las ecuaciones estacionarias (7.3), buscando el dominio de existencia de los dipolos en el espacio de parámetros (s, λ) . Un ejemplo de estas familias de soluciones lo tenemos en la Figura 7.4(a), donde hemos fijado la saturación en $s = 0.5$.

Hemos reproducido el análisis de estabilidad utilizando como estado base las soluciones tipo dipolo. El resultado principal es que las ecuaciones linealizadas no convergen a ningún valor particular de $\text{Im}(\mu)$, lo cual sugiere de forma no concluyente que los autovalores de los modos inestables, de existir, o bien son muy pequeños, o corresponden a distribuciones extrañas que apenas se ven excitadas por perturbaciones aleatorias.

Para obtener más información sobre la dinámica del dipolo, hemos propagado numéricamente diferentes soluciones perturbadas, resolviendo las ecuaciones completas (7.1) a lo largo de distancias superiores a cientos de veces la longitud

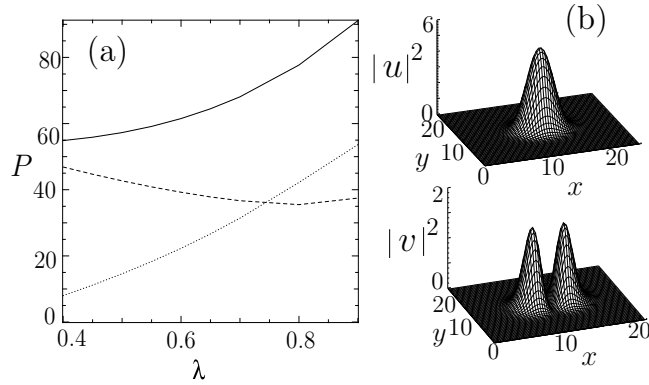


Fig. 7.4: (a) Diagrama de potencial del solitón tipo dipolo en función del autovalor no lineal, λ , para una saturabilidad determinada, $s = 0.5$. (b) Perfil de intensidad típico de las componentes u (arriba) y v (abajo) de estas soluciones ($\lambda = 0.65$, $s = 0.5$).

de difracción².

Hemos realizado dos tipos de experimentos numéricos. Primero hemos comprobado que el dipolo sobrevive manteniendo su forma cuando es sometido a pequeñas perturbaciones y a ruido aleatorio. Con esto demostramos que el dipolo es lo bastante estable para ser susceptible de observación experimental.

El segundo juego de pruebas está formado por perturbaciones fuertes de la intensidad de una componente frente a otra y de un lóbulo del dipolo frente al otro. Estos experimentos dan lugar a oscilaciones transversales en la componente dipolar y en la componente gaussiana, con una dinámica [Figura 7.5] que semeja la de dos haces en espiral con momento angular cero [15].

De estas simulaciones numéricas se desprende que las soluciones de tipo dipolo forman objetos robustos, con vidas largas y capaces de soportar una amplia familia de perturbaciones equiparables al ruido y las desalineaciones que puedan surgir en los experimentos. Esta aparente estabilidad persiste incluso en regímenes donde la intensidad de la segunda componente es mucho mayor ($P_v > P_u$), una región que no es accesible por medio de solitones tipo vórtice debido a su gran inestabilidad.

Por último debemos mencionar que existen otros modelos físicos donde soluciones estables, asimétricas y con geometría dipolar juegan un papel importante en la dinámica de ondas no lineales. Todos estos modelos, sin embargo, se limitan a estructuras *escalares*, de una sola componente. Los ejemplos más conocidos son el solitón de Larichev-Reznik, una solución localizada de la ecuación de Charney para las ondas de Rossby [78], el solitón vectorial de Alfvén en un plasma inhomogéneo [102]. Otros tipos de ondas solitarias dipolares surgen en estados ligados de dos

² En los experimentos actuales, el cristal fotorrefractivo, de unos 20 mm, viene a medir entre 100 y 200 longitudes de difracción.

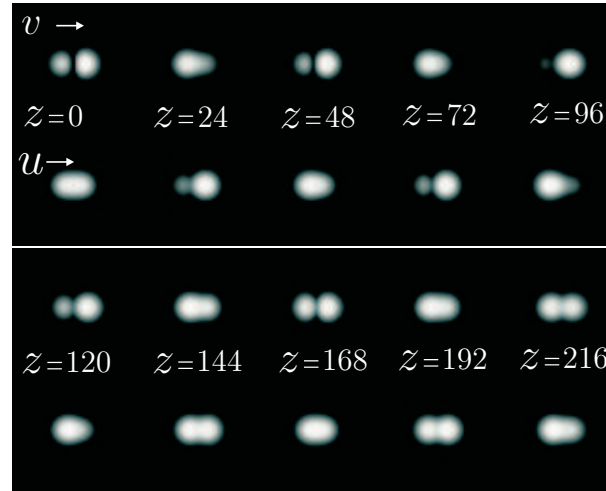


Fig. 7.5: Evolución numérica de un solitón vectorial de tipo dipolo, $(\lambda, s) = (0.7, 0.5)$, después de trasvasar un 25% de la intensidad total de un lóbulo al otro. Mostramos los perfiles de intensidad de las componentes u y v sobre el plano ortogonal a la dirección de propagación $[-7 < (x, y) < 7]$.

solitones en medios no-locales [88] o con anisotropía no-local [84], donde existe una interacción anómala de dos solitones con fases opuestas. Sin embargo la dinámica exhibida por todos estos sistemas difiere radicalmente de la del problema que hemos considerado, por lo que el solitón vectorial de tipo dipolo constituye un nuevo tipo de onda solitaria, susceptible de aparecer en otros campos de la Física.

7.3 Dinámica de colisiones de solitones dipolares

7.3.1 Moléculas de luz

Desde el principio de los tiempos, la Física ha estudiado los objetos sencillos y cómo interaccionaban para formar sistemas complejos. Algunos éxitos reseñables en esta línea incluyen la teoría atómica de la materia, el descubrimiento de la estructura del núcleo en término de protones y neutrones y, más recientemente, la separación de nucleones en quarks. Podría parecer que esta línea de investigación sólo es aplicable a objetos “sólidos”, con masa, y que no es posible nada similar para luz.

Sin embargo desde los años 70 se conoce bien la existencia de objetos robustos y elementales formados por la luz al propagarse en determinados materiales. Estos *solitones espaciales ópticos*, estados autoatrapados de luz con propiedades semejantes a las de una partícula y capaces de interaccionar entre sí [118], han atraído un considerable interés en los últimos años como posible fundamentación de los

dispositivos de conmutación puramente ópticos, donde la luz podría utilizarse para guiar y manipular a la luz misma [112, 115].

El carácter robusto de los solitones espaciales ópticos y sus interacciones [118] nos permiten establecer una analogía con física atómica en la que el solitón espacial sería una “átomo de luz”. Llegando más lejos, podemos combinar dos o más haces de luz generados por una misma fuente coherente para obtener estados ligados de solitones o solitones vectoriales, en un proceso denominaríamos como generación de “moléculas de luz”.

De hecho, en la sección anterior predijimos la existencia de una *molécula de luz estable* denominada solitón vectorial de tipo dipolo (o “dipolo” por simplicidad). Dicho estado se origina al combinar un haz solitónico guía con un segundo haz coherente donde se imprime una distribución de fase. La existencia del dipolo ha sido recientemente confirmada en experimentos [76], donde el dipolo se obtiene a partir de la desintegración de un solitón vectorial inestable [90] o bien directamente, aplicando una máscara de fase.

En las siguientes secciones analizaremos experimentos de colisión que involucran dipolos (“moléculas de luz”) y solitones escalares (“átomos de luz”). Los experimentos numéricos dejan patente la naturaleza compuesta del dipolo, con fenómenos semejantes a los de reacciones químicas: absorción de un solitón, reemplazo de un lóbulo del dipolo por un solitón entrante, fisión de un dipolo, etc.

7.3.2 Análisis cualitativo

Estamos interesados en la dinámica del dipolo bajo la acción de perturbaciones externas finitas originadas en la colisión con otros objetos. El calificativo “finitas” insiste en el hecho de que no podemos utilizar ecuaciones linealizadas para estudiar estos procesos, y que en su lugar debemos trabajar con las ecuaciones de Schrödinger no lineales acopladas (7.1). Este hecho, combinado con la ausencia de simetría radial del problema, convierte en imposible la tarea de obtener predicciones analíticas sobre la dinámica.

Es en este punto donde la metáfora de átomos y moléculas de luz nos sirve para realizar predicciones cualitativas. Así pues, si consideramos el dipolo como un estado ligado de objetos más sencillos —sean tres solitones o un solitón y dos vórtices de cargas opuestas—, podemos interpretar los resultados de las simulaciones en términos de las interacciones mutuas de estos objetos más sencillos que a continuación pasamos a estudiar.

El componente más sencillo que aparece en el dipolo es el haz solitónico, solitón escalar o simplemente “solitón”. Este objeto consiste en un estado localizado en el cual la distribución de intensidad no presenta ningún cero. El solitón es el estado de menor energía que podemos construir a partir de una intensidad total dada.

Cuando dos de estos solitones se encuentran en distintos haces de luz (digamos uno en u y otro en v), interaccionan incoherentemente (Véase la ecuación (7.1)) y se atraen, pudiendo llegar a formar un estado ligado o “solitón vectorial”, el primer ejemplo de molécula de luz estable.

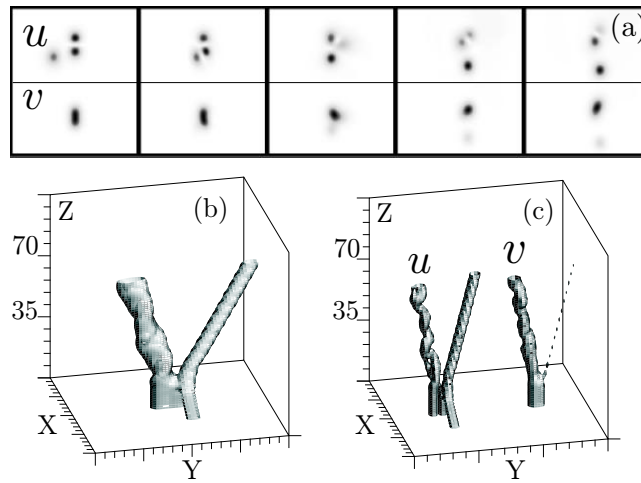


Fig. 7.6: Colisiones entre solitón y dipolo. (a) Imágenes de los perfiles de intensidad de cada haz de luz. (b) Dibujo tridimensional de la intensidad total, $|u|^2 + |v|^2$, que muestra la rotación inducida en el dipolo. (c) Lo mismo que en (b), pero separando las componentes u y v .

Sin embargo, cuando dos solitones han sido generados a partir del mismo haz de luz, nos encontramos con que su interacción es coherente y depende radicalmente de la diferencia de fase entre ambas soluciones. Para diferencias de fase pequeñas, la interacción es atractiva, mientras que para diferencias de fase del orden de π la interacción es repulsiva.

La segunda estructura no lineal que debemos mencionar es el solitón vectorial tipo vórtice (Véase §7.2.4). En este contexto, los vórtices son objetos inestables (§7.2.3) que pueden ser parcialmente estabilizados (esto es, conseguir que sobrevivan a grandes distancias de propagación) al coexistir con un solitón de gran intensidad. En estas condiciones el haz solitónico, u , actúa de guía de ondas para la componente cargada, v . El solitón vectorial de tipo vórtice constituye un ejemplo de molécula deslocalizada inestable.

Finalmente, en relación al dipolo, aunque es dinámicamente incorrecto, también puede ser considerado como una guía de ondas solitónica que confina y estabiliza una estructura compleja en el segundo haz, v . Desde el punto de vista intuitivo el dipolo también puede ser considerado, por tanto, como una molécula donde sus constituyentes son perfectamente distinguibles. Es importante señalar que la estructura dipolar del haz u [Figura 7.1(c)] es matemáticamente equivalente a una combinación lineal de dos vórtices con cargas opuestas o a una pareja de solitones con una diferencia de fase de π , cuya repulsión se equilibra gracias a la atracción del solitón en u . Esta descomposición resultará evidente en los experimentos de colisión, donde un dipolo es capaz de generar vórtices y parejas de solitones escalares.

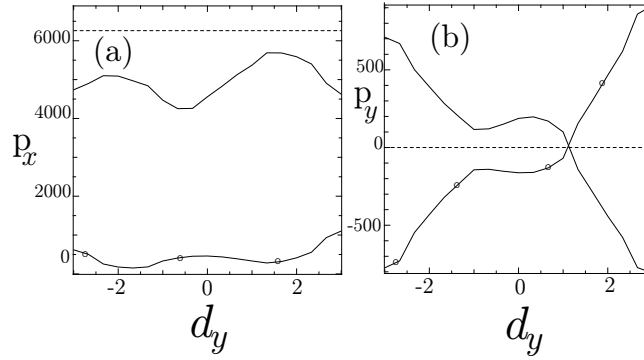


Fig. 7.7: (a, b) Componentes del momento lineal del solitón incidente (línea continua) y del dipolo (círculos) después de una colisión inelástica con un momento lineal importante, $\mathbf{p}_u \equiv -i \int u^* \nabla u \, d\mathbf{r}_\perp$, en función del parámetro de impacto d_y . Se puede apreciar el papel fundamental que juega la asimetría del dipolo. El momento lineal total en la dirección transversal, p_y , es distinto de cero por la radiación resultante.

7.3.3 Colisiones entre solitón y dipolo.

El primer tipo de simulaciones numéricas que presentaremos consiste en el disparo de un solitón escalar contra un solitón vectorial de tipo dipolo. Estas simulaciones han sido realizadas utilizando la técnica de operadores “split-step”, donde la aplicación de los operadores de evolución se calculan utilizando la transformada rápida de Fourier, sobre mallas que contienen 515×512 puntos y que cubren un dominio rectangular de 68×34 unidades. El dato inicial apropiado para este tipo de colisiones consiste en una combinación lineal de estados estacionarios

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_{dipole}(\mathbf{x}) + u_{soliton}(\mathbf{x} - \mathbf{d})e^{-ip_0 x}, \quad (7.7a)$$

$$v(\mathbf{x}, 0) = v_{dipole}(\mathbf{x}). \quad (7.7b)$$

Aquí $\mathbf{d} = (d_x, d_y)$, $d_x \gg d_y$, d_y representa el *parámetro de impacto* y $\mathbf{p}_0$ es proporcional al momento lineal inicial del solitón incidente. Las funciones u_{dipole} , $u_{soliton}$, y v_{dipole} se han obtenido por medio de una técnica de minimización apropiada que se describirá en el Capítulo 10 (Véase §10.5).

Solitones dispersados

El resultado de estos experimentos consiste en una colisión inelástica en la que el solitón surge deflectado y el dipolo gana *momento lineal* y *momento angular*. Dicho proceso ocurre cuando el haz entrante posee una gran cantidad de momento lineal o tiene una diferencia de fase apropiada respecto del dipolo.

Por ejemplo, en la Figura 7.6 el solitón incidente tiene signo (−) y colisiona contra un lóbulo del dipolo con signo (+). La conservación del momento lineal total $\mathbf{p} = -i \int \{u^* \nabla u + v^* \nabla v\} d\mathbf{r}_\perp$ y la del momento angular total

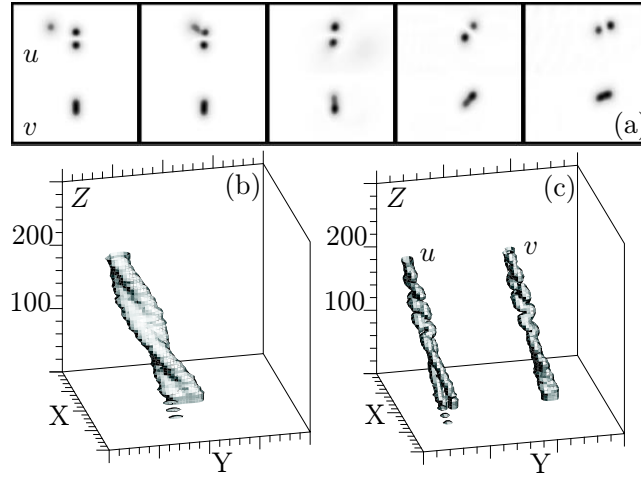


Fig. 7.8: Absorción del solitón por parte del dipolo. (a) Perfil de intensidad de cada haz —a más oscuro mayor intensidad—. (b) Superficies de contorno de la intensidad total de luz. (b) Superficies de contorno de las distribuciones de intensidad de cada componente.

$L = -i \int \{u^*(x\partial_y - y\partial_x)u + v^*(x\partial_y - y\partial_x)v\} d\mathbf{r}_\perp$, obliga al dipolo a girar y el solitón sale, en este caso, formando un ángulo de 90 grados con la dirección inicial.

Cuando el momento lineal del solitón incidente, $\mathbf{p} = \int u_{soliton}^* \nabla u_{soliton} d\mathbf{r}_\perp$, es grande, el solitón se mueve demasiado deprisa para sufrir la influencia destructiva del dipolo y la fase relativa respecto del dipolo apenas juega ningún papel. En la Figura 7.7 representamos el intercambio de momento lineal entre el solitón y el dipolo como función del parámetro de impacto. La interacción efectiva es claramente atractiva: un solitón proveniente de abajo ($d_y > 0$) es arrastrado por el dipolo y surge deflectado hacia arriba ($p_y < 0$), y viceversa. Finalmente, la asimetría del dipolo queda de manifiesto en la distribución de momentos.

Solitones absorbidos

La segunda familia de experimentos se ha realizado con solitones lentos y por tanto en condiciones en las que la interacción solitón–dipolo puede tener efectos drásticos. Así ocurre que para algunos parámetros de impacto el solitón incidente se acerca demasiado al lóbulo del dipolo con una menor diferencia de fase, siendo absorbido por él. Como muestra la Figura 7.8, el resultado es que el dipolo absorbe parte del solitón incidente, libera el resto en forma de radiación (apenas apreciable) y se excitan grados de libertad internos que dan lugar a la rotación del conjunto.

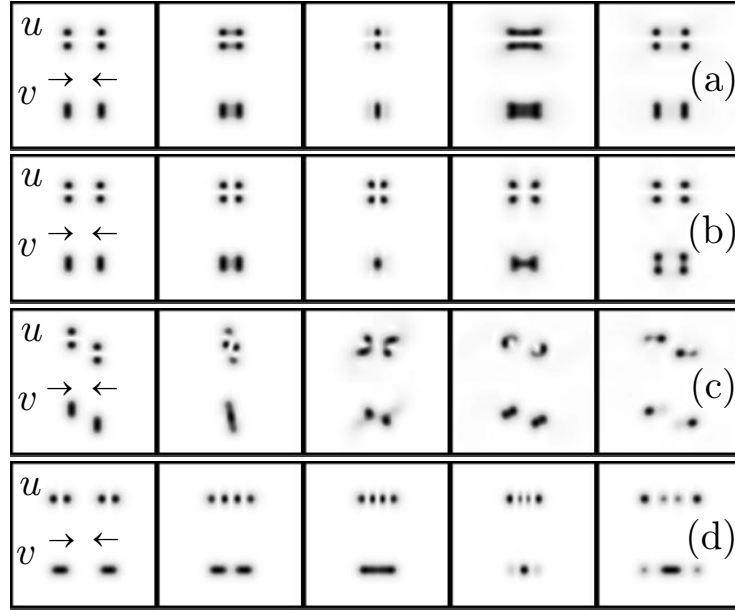


Fig. 7.9: Colisiones entre dipolos vistas desde el centro de masas.

7.3.4 Colisiones entre dipolos

La última familia de experimentos numéricos considerada corresponde a lanzar dos dipolos uno contra otro. El dato inicial de estas simulaciones es, por tanto, de la forma

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_{dipole}(\mathbf{x} + \mathbf{d})e^{ip_0x} + u_{dipole}(\mathbf{x} - \mathbf{d})e^{-ip_0x}, \quad (7.8a)$$

$$v(\mathbf{x}, 0) = v_{dipole}(\mathbf{x} + \mathbf{d})e^{ip_0x} + v_{dipole}(\mathbf{x} - \mathbf{d})e^{-ip_0x}. \quad (7.8b)$$

Este tipo de colisiones resulta una rica y variada fuente de fenómenos que dependen de la orientación mutua de los dipolos, de la energía inicial y de sus fases relativas.

En las Figuras 7.9(a,c) mostramos tres casos en los que se preserva la estructura de los dipolos. En la Figura 7.9(a) vemos una colisión en fase con interacción débil donde los dipolos se atraviesan mutuamente. En la Figura 7.9(b) mostramos una colisión en oposición de fase con repulsión. En tercer lugar, en la Figura 7.9(c) mostramos un ejemplo significativo de colisión en la que el parámetro de impacto es distinto de cero. En este caso la dinámica es complicada, e involucra la creación de dos solitones vectoriales de tipo vórtice y su degeneración en un par de haces en espiral. Finalmente en la Figura 7.9(d) mostramos un proceso inelástico interesante en el que dos dipolos se fusionan para dar lugar a un estado complejo que se desintegra formando un nuevo dipolo y una pareja de solitones escalares. Todos estos procesos pueden explicarse en términos de las fases relativas de los

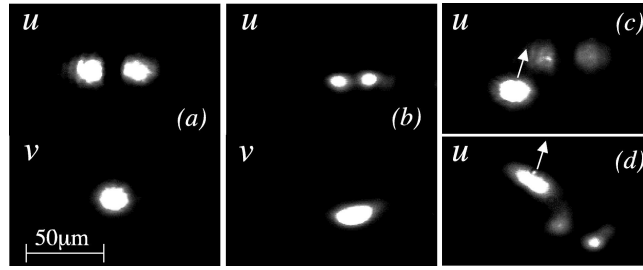


Fig. 7.10: Demostración experimental de colisiones entre un solitón y un dipolo. (a,b) Formación del dipolo a partir de dos haces de luz coherente en oposición de fase (v) y de un haz coincidente con ellos (u): (a) haces de entrada, (b) haces a la salida. Los parámetros experimentales son $V = 1.8$ kV, $z = 10$ mm, $P_v = 2 \mu\text{W}$ y $P_u = 2.6 \mu\text{W}$. (c,d) Interacción entre solitón y dipolo antes (c) y después (d) de la colisión. Sólo se muestra la componente dipolar, u , del conjunto. La rotación del dipolo a la salida es claramente visible.

lóbulos de cada dipolo, como explicamos anteriormente.

7.3.5 Resultados experimentales

Los primeros experimentos sobre generación de solitones vectoriales de tipo dipolo aparecen reflejados en la referencia [76]. En estos experimentos el haz de luz que da lugar al dipolo surge de uno de estos procesos

Diseño de la fase: La luz de una fuente coherente se separa en dos componentes. Una de ellas atraviesa una máscara de fase donde adquiere la forma dipolar, siendo luego recombinada con la componente gaussiana para formar el solitón vectorial.

Desintegración de un vórtice: Un solitón vectorial de tipo vórtice creado a partir de las técnicas de la referencia [90] decae espontáneamente formando una estructura asimétrica.

Cualquiera de estos métodos nos proporciona una estructura dipolar con un salto en la fase de la onda a lo largo del plano nodal, que es perpendicular al eje óptico del cristal (Véase la componente u de la figura 7.10(a)). El conjunto atraviesa un cristal SBN fotorrefractivo [76], sometido a una diferencia de potencial constante de 1.5-2.5 kV a lo largo del eje óptico. La propagación de la pareja de haces de luz en el medio saturable da lugar al autoatrapamiento de la luz y a la formación del dipolo. Para controlar el grado de saturación iluminamos uniformemente el cristal con un tercer haz de grandes dimensiones obtenido de la misma fuente de luz.

Para observar los efectos de la interacción solitón-dipolo, lanzamos un haz solitónico contra el dipolo. En la Figura 7.10(c) mostramos el solitón incidente

junto con la componente asimétrica, v , del dipolo. Como resultado de la colisión el solitón surge deflectado, mientras que el dipolo absorbe parte del momento angular e inicia una rotación que es aparente en la Figura 7.10(d). Resulta difícil establecer una comparación cuantitativa entre la teoría y el experimento debido a que el modelo original es isotrópo, mientras que el cristal fotorrefractivo posee una no-linealidad no-local y anisotrópo [130, 119], que induce otra serie de cambios en el dipolo.

7.4 Conclusiones

Hemos demostrado la existencia de soluciones vectoriales asimétricas, denominadas *dipolos*, robustas y susceptibles de manipulación experimental. Frente a la estabilidad de estos solitones vectoriales hemos demostrado que estados más sencillos con simetría axial resultan completamente inestables para todo tipo de parámetros experimentales.

Hemos estudiado la fenomenología de las colisiones entre estos dipolos y otras estructuras localizadas. Aparte de comprobar la solidez del dipolo frente a perturbaciones intensas, ha quedado demostrado que se comportan como moléculas ligadas de luz, con dos importantes grados de libertad que son la rotación del conjunto y las oscilaciones de los lóbulos del dipolo. Ambos grados de libertad pueden ser excitados experimentalmente en colisiones con solitones.

La amplia variedad de fenómenos descritos en este capítulo convierte a los dipolos en candidatos para aplicación práctica en óptica integrada. En este sentido, el solitón dipolar equivale a la operación de un transistor electrónico, con una respuesta no lineal predecible que depende de la orientación de la entrada y capaz de conmutación y amplificación.

Parte III

MÉTODOS MATEMÁTICOS EN EC. DE SCHRÖDINGER NO LINEALES

8. DESCRIPCIÓN FINITO-DIMENSIONAL DE CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN

Resumen

En este capítulo estudiaremos modelos finito-dimensionales para la dinámica de paquetes de onda en la ecuación de Schrödinger no lineal. En primer lugar se introduce el *método variacional*, una técnica basada en aproximaciones pseudo-analíticas de la función de onda con un número finito de parámetros libres que ha proporcionado resultados bastante precisos en Óptica y condensación de Bose-Einstein. A continuación se presenta una técnica mucho más potente denominada *método de momentos*, que consiste en el estudio de propiedades integrales de un número finito de valores esperados —centro de masas, dimensiones, velocidades, etc—, estableciendo ecuaciones cerradas para su evolución. Probaremos su validez en diversos contextos con geometrías variadas y demostraremos que el método variacional no es sino una restricción del método de momentos.

8.1 Modelos variacionales de dimensión finita

La solución de ecuaciones de onda no lineales, tales como (2.14), que representan fenómenos físicos relevantes es una tarea difícil, pero también del máximo interés. En general no es posible encontrar soluciones exactas salvo para una pequeña familia de problemas donde las ecuaciones son integrables. Por ejemplo, durante los años 70 se descubrieron diversas técnicas matemáticas que permitieron la integración de algunas ecuaciones importantes [128]. En todos los demás problemas no integrables es del máximo interés desarrollar técnicas de aproximación rigurosas.

En esta sección nos ocupamos de una técnica conocida como método variacional, técnica de coordenadas colectivas, ecuaciones de balance de energía, aproximación de partícula equivalente, etc. Esta técnica fue desarrollada originalmente por D. Anderson [5] para problemas unidimensionales a partir del procedimiento de optimización de Ritz. El método consiste en asumir una forma parametrizada para la función de onda y obtener ecuaciones diferenciales ordinarias para la evolución de esos parámetros libres.

Aunque las mismas ecuaciones son extensibles a la Óptica no lineal, en este capítulo nos interesará obtener dinámicas finito-dimensionales para la evolución de un condensado gaseoso a partir de un estado fundamental ligeramente perturbado. La evolución de este condensado viene descrita por la ecuación de Gross-Pitaevskii (2.14) y por la integral de acción (2.19). El método variacional utiliza esta última formulación para conocer cómo evolucionan los parámetros de una solución prueba o “ansatz”.

El ansatz variacional que utilizaremos se construye a partir de gaussianas con 16 parámetros libres

$$\psi(x, y, z, t) = A \prod_{\eta=x,y,z} \exp \left\{ \frac{-(\eta - \eta_0)^2}{2w_\eta^2} + i\eta\alpha_\eta + i\eta^2\beta_\eta \right\}. \quad (8.1)$$

En el límite lineal, $U = 0$, la forma del estado fundamental es una gaussiana con anchuras dadas por las longitudes características de la trampa (2.7). En el caso no

lineal con interacción débil, la gaussiana sigue siendo una aceptable aproximación que ha proporcionado resultados en buen acuerdo con los experimentos [98, 97]. Como veremos, en esta aproximación son esenciales los polinomios que rigen la evolución de la fase.

Antes de proseguir, resulta conveniente realizar un cambio de variables, de A y $\tilde{A}$, a N (la norma de la función de ondas) y ϕ (la fase global)

$$A = \frac{N}{\pi^{3/2} w_x w_y w_z} e^{i\phi}. \quad (8.2)$$

El resto de las variables son las anchuras de la nube, w_η , las velocidades del centro de masas, α_η , las velocidades de las anchuras de la nube, β_η , y el centro de la misma (x_0, y_0, z_0) .

Esta función de onda debe ser introducida en la acción (2.19) para obtener una lagrangiana promedio por partícula

$$\begin{aligned} \frac{L}{N} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{L} d^3r &= \hbar \dot{\phi} + \sum_{\eta} \left\{ \frac{w_\eta^2}{2} + \eta_0^2 \right\} \left\{ \hbar \dot{\beta}_\eta + \frac{2\hbar^2}{m} \beta_\eta^2 + \frac{1}{2} m \omega_\eta^2 \lambda_\eta^2(t) \right\} \\ &+ \sum_{\eta} \left\{ \hbar \dot{\alpha}_\eta + \frac{\hbar^2}{m} 2\alpha_\eta \beta_\eta \right\} + \frac{\hbar^2}{m} \sum_{\eta} \left\{ \frac{1}{2w_\eta^2} + \alpha_\eta^2 \right\} \\ &+ \frac{U_0}{4\sqrt{2}} \frac{N}{\pi^{3/2} w_x w_y w_z}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

La evolución de los parámetros libres viene regida por las ecuaciones de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_j}, \quad (8.4)$$

que nos proporciona ecuaciones para la conservación de la norma

$$\frac{dN}{dt} = 0; \quad (8.5)$$

el movimiento del centro de masas

$$\ddot{\eta}_0 + m\nu^2 \lambda_\eta(t) \eta_0 = 0; \quad (8.6)$$

la evolución de las velocidades

$$\beta_\eta = \frac{m \dot{w}_\eta}{2\hbar w_\eta}, \quad (8.7a)$$

$$\alpha_\eta = \frac{m}{\hbar} \dot{\eta}_0 - 2\beta_\eta \eta_0; \quad (8.7b)$$

y por último las anchuras

$$\ddot{w}_x + \nu^2 \lambda_x^2(t) w_x = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{1}{w_x^3} + \frac{U_0}{2\sqrt{2}m} \frac{N}{\pi^{3/2} w_x^2 w_y w_z}, \quad (8.8a)$$

$$\ddot{w}_y + \nu^2 \lambda_y^2(t) w_y = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{1}{w_y^3} + \frac{U_0}{2\sqrt{2}m} \frac{N}{\pi^{3/2} w_x w_y^2 w_z}, \quad (8.8b)$$

$$\ddot{w}_z + \nu^2 \lambda_z^2(t) w_z = \frac{\hbar^2}{m^2} \frac{1}{w_z^3} + \frac{U_0}{2\sqrt{2}m} \frac{N}{\pi^{3/2} w_x w_y w_z^2}. \quad (8.8c)$$

Como se puede apreciar, la introducción de un potencial dependiente del tiempo no afecta la forma de las ecuaciones, que permanecen iguales a las de la análisis estacionarios [97].

Por último podemos incorporar la norma a las ecuaciones realizando el cambio de variables habitual, con la intensidad de la interacción interatómica, $U = \sqrt{2/\pi} N a/a_0$, y las anchuras $a_i = \sqrt{\hbar/(m\omega_i)}$ como protagonistas. Esto nos lleva a un sistema de tres ecuaciones diferenciales ordinarias con un acoplo altamente no lineal

$$\ddot{v}_x + \lambda_x^2(t) v_x = \frac{1}{v_x^3} + \frac{U}{v_x^2 v_y v_z}, \quad (8.9a)$$

$$\ddot{v}_y + \lambda_y^2(t) v_y = \frac{1}{v_y^3} + \frac{U}{v_x v_y^2 v_z}, \quad (8.9b)$$

$$\ddot{v}_z + \lambda_z^2(t) v_z = \frac{1}{v_z^3} + \frac{U}{v_x v_y v_z^2}. \quad (8.9c)$$

La utilidad de estas ecuaciones es múltiple. Los puntos de equilibrio representan los estados estacionarios del condensado cuando la fracción no condensada es despreciable [98], la linealización de las ecuaciones permite estudiar las oscilaciones de una nube de bosones deformada [97] y por último es posible integrar el caso dependiente del tiempo para explicar la dinámica resonante del mismo bajo perturbaciones dependientes del tiempo (Véase el Capítulo 9 o la referencia [43]).

8.2 Las ecuaciones de momentos

Además de en el estudio de la dinámica de condensados, el método variacional ha encontrado aplicación en otros campos de la Física como son la Óptica no lineal [31, 17, 70, 73, 2], las ecuaciones de onda no lineales con perturbaciones aleatorias [94, 75], las ecuaciones no locales [1] y la Física de la Materia Condensada [110].

Ahora bien, uno puede objetar que este método tiene una base teórica pobre. Después de todo, ¿quién nos asegura que la solución que estamos aproximando responde verdaderamente a la forma que imponemos? Si nuestro ansatz es erróneo seguiremos llegando a ecuaciones consistentes pero completamente alejadas de la realidad [8] y que probablemente proporcionarán resultados erróneos. Y viceversa, ¿cómo puede ser que con aproximaciones de la densidad erróneas obtengamos

Definición	Interpretación
$N = \int \rho$	Norma, número de partículas o intensidad
$X_i = \int x_i \rho$	Centro de masas
$V_i = \int \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rho$	Velocidad del centro de masas
$W_i = \int x_i^2 \rho$	Anchuras de la nube o paquete
$B_i = 2 \int x_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rho$	Velocidad de crecimiento
$K_i = -\frac{1}{2} \int \psi \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \psi$	Energía cinética
$J = \int G(\rho)$	Energía de auto-interacción

Tab. 8.1: Definiciones de los momentos e interpretación física.

resultados cuantitativamente exactos? Prueba de ello son las ecuaciones que obtuvimos en el apartado anterior (8.9). Dichas ecuaciones proporcionan valores precisos de las frecuencias de oscilación de un paquete de bosones incluso en un régimen de alta interacción, donde la forma del paquete está más próxima a una Thomas–Fermi (2.18) que a una gaussiana (8.1).

Por esta razón hemos intentado obtener ecuaciones similares que describan las propiedades más relevantes de la función de ondas mediante un número finito de grados de libertad y argumentos puramente físicos. El procedimiento es bastante general y sirve para estudiar cualquier ecuación de Schrödinger n -dimensional con un potencial armónico

$$i\partial_t \psi = -\frac{1}{2} \Delta \psi + V(\mathbf{r})\psi + g(|\psi|^2, t)\psi - i\sigma(|\psi|^2, t)\psi. \quad (8.10)$$

Tanto $g(\rho, t)$ como $\sigma(\rho, t)$ son funciones en general no locales de la densidad $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$, y representan términos de auto-interacción y de pérdidas.

Para facilitar el desarrollo matemático separaremos la función de onda en las variables de Madelung módulo ó densidad, ρ , y fase o potencial de velocidad, ϕ ,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{i\phi(\mathbf{x}, t)}. \quad (8.11)$$

Necesitaremos también una densidad de energía de interacción, $G(\rho)$, obtenida a partir de la relación

$$g = \partial G / \partial \rho.$$

Estos términos no-lineales deberán ser funciones analíticas que se anulen cuando la densidad tienda a cero

$$g(\rho), G(\rho) \rightarrow 0, \rho \rightarrow 0, \quad (8.12)$$

para asegurar que todas las integrales están bien definidas.

En la Tabla 8.2 introducimos las cantidades que denominamos *momentos de la distribución ψ* . Algunos de ellos están relacionados con los momentos estadísticos de la distribución de densidad, y todos ellos tienen algún significado físico¹.

Las ecuaciones de evolución para estos momentos son las siguientes

$$\frac{dN}{dt} = -2 \int \sigma \rho, \quad (8.13a)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = V_i - 2 \int \sigma x_i \rho, \quad (8.13b)$$

$$\frac{dV_i}{dt} = -\omega_i X_i - 2 \int \sigma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rho, \quad (8.13c)$$

$$\frac{dW_i}{dt} = B_i - 2 \int \sigma x_i^2 \rho, \quad (8.13d)$$

$$\frac{dB_i}{dt} = 4K_i - 2\omega_i^2 W_i - 2 \int DG - 4 \int \sigma x_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \rho, \quad (8.13e)$$

$$\frac{dK_i}{dt} = -\frac{1}{2} \omega_i^2 B_i - \int DG \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} \quad (8.13f)$$

$$+ \int \sigma \left[\sqrt{\rho} \frac{\partial^2 \sqrt{\rho}}{\partial x_i^2} - \rho \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)^2 \right], \quad (8.13g)$$

$$\frac{dJ}{dt} = \sum_i \int DG \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} - 2 \int \sigma g \rho + \int \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (8.13h)$$

En lo sucesivo emplearemos DG como abreviatura de $G(\rho) - g(\rho)\rho$, y nos concentraremos en el caso más común en el que la disipación es independiente de la densidad, $\sigma(|\psi|^2, t) = \sigma(t)$. Con estas simplificaciones las ecuaciones quedan en la siguiente forma

$$\frac{dN}{dt} = -2\sigma N, \quad (8.14a)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = V_i - 2\sigma X_i, \quad (8.14b)$$

$$\frac{dV_i}{dt} = -\omega_i X_i - 2\sigma V_i, \quad (8.14c)$$

$$\frac{dW_i}{dt} = B_i - 2\sigma W_i, \quad (8.14d)$$

$$\frac{dB_i}{dt} = 4K_i - 2\omega_i^2 W_i - 2 \int DG - 2\sigma B_i, \quad (8.14e)$$

$$\frac{dK_i}{dt} = -\frac{1}{2} \omega_i^2 B_i - \int DG \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} - 2\sigma K_i, \quad (8.14f)$$

$$\frac{dJ}{dt} = \sum_i \int DG \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} - 2J + \int \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (8.14g)$$

¹ Véase la referencia [105] para interpretaciones relativas a la Óptica.

Algunas de estas leyes surgen en otros tratamientos [72, 71, 105] que se concentran en formas particulares de la solución o simetrías concretas. En los apartados que siguen expondremos todas las situaciones en las que podemos extraer conjuntos de ecuaciones diferenciales ordinarias cerradas para algunas o todas las variables implicadas. Dicho procedimiento será exacto en casos muy importantes y en los restantes implicará aproximaciones intuitivamente justificables y que se revelan en la práctica como precisas.

Antes de continuar resultará conveniente eliminar los términos disipativos reescalando las soluciones en la forma $\gamma = \int_0^t \sigma(t') dt'$, de manera que la nueva distribución de densidad sea $\tilde{\rho} = e^\gamma \rho$. Dicho cambio no implica variación en la distribución de fase ni en el campo de velocidades definido por esta, $\mathbf{v} = \nabla \theta$.

8.3 Situaciones con ecuaciones cerradas

8.3.1 Ecuaciones de Newton para el centro de masas

A partir de las ecuaciones (8.14b-8.14c) obtenemos un subconjunto cerrado y *exacto* para la evolución de los momentos de órdenes cero y uno, que incluyen la posición del centro de masas y su velocidad

$$\frac{d^2 X_i}{dt^2} = -\omega_i(t) X_i - 2\sigma(t) \frac{dX_i}{dt} - 2\sigma(t) X_i. \quad (8.15)$$

Estas ecuaciones generalizan el resultado [43] previamente obtenido para sistemas conservativos a partir de las ecuaciones de Lagrange, y son el equivalente a las ecuaciones de Ehrenfest de la Mecánica Cuántica. De hecho, en el caso conservativo es posible escribir las ecuaciones (8.15) como

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle = \langle -i\nabla \rangle \quad (8.16a)$$

$$\frac{d}{dt} \langle -i\nabla \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{x}, t) \rangle. \quad (8.16b)$$

El hecho de que la evolución del centro de masas responda a una ecuación integrable implica por un lado que sólo nos quedan $3n+1$ ecuaciones de momentos por cerrar. Además, la evolución del centro de masas nos proporciona información sobre el entorno que confina al paquete de ondas. De esta forma es posible calibrar de manera precisa las frecuencias de confinamiento de los condensados en las trampas magnéticas. Y por último es posible diseñar experimentos a medida que dirijan estos paquetes de onda sin más que crear un potencial adecuado. Esta idea ha dado lugar a experimentos de transporte de condensados entre trampas, junto con experimentos de colisiones y rebotes de los mismos contra barreras de potencial.

8.3.2 Cierre de las ecuaciones en el caso lineal

Cuando el término no lineal, $G(\rho)$, desaparece de las ecuaciones, los diferentes grados de libertad se desacoplan entre sí y llegamos a ecuaciones de momentos lineales para las anchuras de cada eje. El procedimiento parte de las ecuaciones desacopladas

$$\frac{dW_i}{dt} = B_i, \quad (8.17a)$$

$$\frac{dB_i}{dt} = 4K_i - 2\omega^2(t)W_i, \quad (8.17b)$$

$$\frac{dK_i}{dt} = -\frac{1}{2}\omega^2(t)B_i. \quad (8.17c)$$

Cada subsistema de ecuaciones posee una cantidad conservada asociada

$$M_i = K_i W_i - 4B_i^2, \quad (8.18)$$

que tras cierta manipulación nos permite obtener a una EDO de segundo orden para cada una de las anchuras cuadráticas medias de la nube, $R_i = \sqrt{W_i}$,

$$\ddot{R}_i = -\omega^2(t)R_i + \frac{M}{R_i^3}. \quad (8.19)$$

8.3.3 Cierre de las ecuaciones con simetría radial

Existen otros casos importantes en los que obtenemos ecuaciones cerradas: estos corresponden a problemas conservativos, $\sigma = 0$, en potenciales con simetría esférica, $\omega_i = \omega(t)$, donde tiene sentido definir las anchuras radiales

$$W_r = \sum_i W_i, \quad B_r = \sum_i B_i, \quad (8.20a)$$

$$K_r = \sum_i K_i, \quad D = \int [G(\rho) - \rho g(\rho)] d^n x. \quad (8.20b)$$

Estos nuevos momentos responden a ecuaciones más sencillas

$$\frac{dW_r}{dt} = B_r, \quad (8.21a)$$

$$\frac{dB_r}{dt} = 4K_r - 2\omega^2(t)W_r - 2dD, \quad (8.21b)$$

$$\frac{dK_r}{dt} = -\frac{1}{2}\omega^2(t)B_r - \frac{dJ}{dt}. \quad (8.21c)$$

La integrabilidad de estas ecuaciones exige que el término no-lineal sea una determinada potencia de la distribución de densidad, $G = U\rho^\kappa$. Reemplazando esta expresión en las ecuaciones anteriores obtenemos un nuevo conjunto de ecuaciones

cerradas salvo un término desconocido que corresponde a la energía de auto-interacción J

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = -\omega(t)R + \frac{2M}{R^3} + \frac{(d(\kappa - 1) - 2)J}{R}, \quad (8.22)$$

$$\frac{dM}{dt} = -(d(\kappa - 1) - 2)JR \frac{dR}{dt}, \quad (8.23)$$

$$M = (K_r + J)W_r - B_r^2/8, \quad (8.24)$$

$$R = \sqrt{W_r}. \quad (8.25)$$

Cuando el exponente satisface $\kappa = (d+2)/d$ los términos en J desaparecen de las ecuaciones, que de nuevo se cierran. Además en este caso la obtenemos una nueva cantidad conservada, M , que sólo depende del dato inicial. Empleando esta cantidad conservada podemos describir la evolución del radio cuadrático medio del paquete de ondas según

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = -\omega(t)R + \frac{2M}{R^3}. \quad (8.26)$$

De todos los problemas cerrados que resultan en este caso, los más relevantes son quizás la ecuación de Gross–Pitaevskii para un condensado en una trampa simétrica y la propagación de un haz de luz coherente en una guía de ondas parabólica. En el primer ejemplo esta ecuación ha sido utilizada para probar la existencia de resonancias extendidas [51], mientras que en el segundo la hemos empleado para describir la focalización de luz mediante el empleo de segmentos guías de onda parabólicas empalmados [96].

8.4 Aproximaciones en el método de momentos

8.4.1 Aproximación de divergencia uniforme

Un tercer caso en que las ecuaciones de momentos se cierran de forma exacta es aquel con una interacción independiente del tiempo, $\partial G/\partial t = 0$, y una distribución de velocidad con divergencia nula. La primera condición es de hecho habitual; la segunda hace uso de la interpretación de la fase como potencial de un campo de velocidades, $\mathbf{v} = \nabla\theta$, de manera que dicha condición se traduce en la ecuación de Laplace para la fase

$$\text{div}(\nabla\phi) = \Delta\phi = 0. \quad (8.27)$$

La condición de divergencia nula (8.27) implica un tipo de flujo en el que no hay concentración de densidad en ningún punto del espacio. En otras palabras, dentro de cualquier volumen entra tanto fluido como sale, de manera que la ecuación de continuidad para la densidad se convierte en una ecuación de transporte

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\rho \cdot \mathbf{v}. \quad (8.28)$$

Este tipo de flujo no impone restricciones en la distribución de densidad y se encuentra en múltiples soluciones de flujo superfluido, donde tenemos una serie de términos polinómicos acompañados de una o más líneas de vórtice,

$$\psi = \rho_B(x_1 \dots x_n; t) e^{i\phi_B}, \quad (8.29a)$$

$$\phi_B = \mathbf{a} \cdot \mathbf{x} + \arctan \frac{x_k - X_k}{x_l - X_l}. \quad (8.29b)$$

La condición de divergencia nula (8.27) implica también la existencia de un número infinito de constantes de evolución que denominaremos “supermomentos”. Cada una de estas constantes se construye a partir de funciones diferenciables de la densidad, $F(\rho)$, que satisfacen la condición de regularidad (8.12)

$$Q(F) = \int F(\rho(\mathbf{x}, t)) d^n x, \quad (8.30)$$

$$\frac{dQ(F)}{dt} = 0, \quad \forall F. \quad (8.31)$$

Mediante el uso de estas constantes resulta fácil demostrar que la cantidad D es también una constante y que es posible obtener ecuaciones cerradas similares a (8.26) para las anchuras de la nube.

La intuición sugiere que la condición de laplaciano cero para la fase (8.27) impone una restricción fuerte sobre la dinámica del paquete de ondas. En concreto, la configuración del paquete, i.e. ρ , debe permanecer auto-semejante y sufrir como mucho *desplazamientos, rotaciones y dilataciones*. Bajo estas condiciones no es de extrañar que todos los supermomentos dependan exclusivamente de la norma $Q(F) = f(N)$ y por tanto permanezcan constantes.

En general las soluciones de la ecuación de Schrödinger no lineal no siguen este tipo de flujos y por tanto la aproximación de orden cero, $\Delta\phi = 0$, no es capaz de describir la evolución del sistema. La siguiente posibilidad es la *aproximación de divergencia uniforme*, que consiste en suponer el laplaciano de la fase uniforme y no necesariamente cero

$$\nabla(\Delta\phi) = 0. \quad (8.32)$$

Un ejemplo importante de estas distribuciones es la que describe el flujo de líneas de vórtice en el interior de un condensado de Bose-Einstein

$$\phi = \phi_B(\vec{x}, t) + \sum_j \beta_j(t) x_j^2, \quad (8.33)$$

donde $\phi_B(\mathbf{x}, t)$ es un término de laplaciano nulo correspondiente al conjunto de vórtices y el término parabólico describe rotaciones y cambios en la forma de la nube. Una versión limitada de esta aproximación con un término lineal en lugar de ϕ_B apareció por primera vez en problemas con simetría radial en la referencia [100] y ha sido aplicada después al estudio de resonancias en ecuaciones de Schrödinger no lineales sometidas a forzado paramétrico [43, 51].

Para demostrar la forma de proceder con esta aproximación supondremos que el término no lineal es de forma polinómica o admite una aproximación en serie de potencias

$$G(\rho) \simeq \sum_k \alpha_k \rho^k. \quad (8.34)$$

Cada uno de los términos del polinomio da lugar a un supermomento distinto,

$$Q^{(m)} = \int \rho^m(\mathbf{x}, t) d^n x, \quad (8.35)$$

con una ecuación de evolución sencilla

$$\frac{dQ^{(m)}}{dt} = -(m-1) \sum_i \beta_i(t) Q^{(m)}. \quad (8.36)$$

Puesto que los parámetros del término cuadrático en la fase son a su vez función de las anchuras del paquete

$$\beta_i = \frac{d}{dt} \log \sqrt{\tilde{W}_i}, \quad (8.37)$$

podemos escribir cada uno de los supermomentos como producto de potencias de estas anchuras

$$Q^{(m)} = C^{(m)} \left(\sqrt{W_1 \dots W_d} \right)^{-m+1}, \quad (8.38)$$

donde las constantes $C^{(m)}$ dependen exclusivamente del dato inicial. Combinando estas funciones obtenemos también expresiones cerradas para todas las integrales donde aparece el término no lineal, $G(\rho)$, las cuales nos conducen finalmente a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias para las anchuras naturales del paquete, $R_i = \sqrt{W_i}$, que en el caso general sin simetría se escriben

$$\frac{d^2 R_i}{dt^2} = -\omega_i R_i + \frac{M_i}{R_i^3} + \frac{\mathcal{G}(R_1 \dots R_d, t)}{R_1}. \quad (8.39)$$

La función $\mathcal{G}$ y las constantes M_i son parámetros completamente determinados por el dato inicial.

8.4.2 Aproximación de momentos independientes

Hemos comprobado que la aproximación de divergencia uniforme conduce a expresiones cerradas para los supermomentos de la densidad, $Q^{(m)}$ en función de las anchuras de esta distribución, W_i . Si bien este procedimiento resulta más potente que los ansatz variacionales habituales, es posible mejorar el método de momentos buscando una mayor precisión en las ecuaciones.

Aunque este es un punto aun sujeto a estudio, la idea básica es asumir que sólo existen un número finito de momentos independientes y expresar todos los demás como función de éstos. Naturalmente, la fidelidad de la aproximación dependerá del número de estas cantidades. El caso más sencillo consiste en tomar como momentos independientes las variables $\{N, W_i\}$. Reescalando la función de onda con respecto a cada una de las coordenadas

$$\psi(x_1, \dots, x_i, \dots) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{1+\epsilon}} \psi(x_1, \dots, \frac{x_i}{1+\epsilon}, \dots), \quad (8.40)$$

y relacionando los cambios a primero orden en $Q^{(m)}$ y W_k llegamos a la ecuación

$$-(m-1)Q^{(m)} = \sum_k 2 \frac{\partial Q^{(m)}}{\partial W_k} W_k. \quad (8.41)$$

Esta ecuación tiene una solución de la forma reflejada en (8.38) y de nuevo podemos obtener expresiones cerradas para todas las integrales desconocidas en (8.13). Al contrario que la aproximación de divergencia uniforme, este procedimiento admite una más fácil generalización que conduciría a una descripción más precisa de la evolución del paquete de ondas.

8.5 Las ecuaciones de momentos en casos prácticos

En las secciones anteriores hemos sugerido distintos argumentos fenomenológicos que permiten cerrar las ecuaciones de momentos (8.13). En los siguientes apartados comprobaremos la validez de estas aproximaciones comparando soluciones numéricas de la ecuación de Gross-Pitaevskii, donde $G(\rho) = \frac{1}{2}U\rho^2$, con las ecuaciones de momentos en la aproximación de momentos independientes. Nuestra elección del término de interacción, viene condicionada por la necesidad de aplicar las ecuaciones resultantes a la descripción de un condensado de Bose-Einstein en capítulos siguientes. Eso significa que debido al exponente, $\kappa = 2$, las ecuaciones sólo se cerrarán de forma exacta en dimensión $d = 2$ con simetría radial, mientras que nosotros trabajaremos típicamente en dimensión $d = 3$.

8.5.1 Cualquier número de dimensiones con simetría radial

Partimos de la ecuación (8.22) que es exacta pero donde tenemos una variable desconocida J que nos impide obtener ecuaciones integrables. Aplicando la aproximación de momentos independientes a primer orden, y utilizando la forma del término no lineal, $G(\rho) = U\rho^2$, llegamos a la aproximación

$$J = \frac{J_0}{R^d}, \quad (8.42)$$

donde $R = \sqrt{\sum_i W_i}$ es el radio cuadrático medio del paquete de ondas, d es la dimensionalidad del espacio y J_0 es una constante que depende del dato inicial.

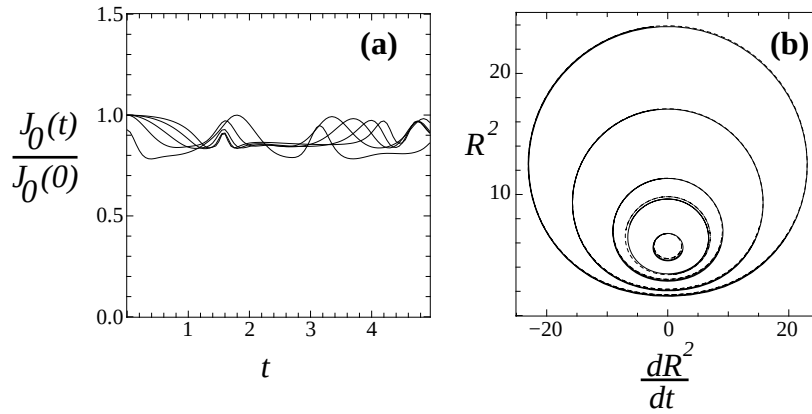


Fig. 8.1: Evolución de un paquete de ondas tridimensional con simetría radial sometido a fuertes distorsiones. (a) Evolución de la cantidad $J_0 = JR^d$ para las soluciones de la ecuación de Gross–Pitaevskii. Comprobamos cómo los valores de J_0 exactas permanecen constante salvo variaciones de un 10% alrededor del valor medio. (b) Órbitas en el espacio de fases formado por el radio cuadrático medio R^2 y su velocidad $\frac{d}{dt}R^2$ para diferentes datos iniciales. Debido a la coincidencia entre las soluciones del método de momentos y las de la ecuación de Gross–Pitaevskii, ambos resultados son indistinguibles.

Esta aproximación, que puede parecer ruda, funciona en el peor de los casos con una precisión del 10% [Figura 8.1(a)].

Empleando la expresión anterior para la variable J es posible llegar de nuevo a un conjunto cerrado de ecuaciones para el radio cuadrático medio

$$\frac{d^2R}{dt^2} = -\omega^2(t)R + \frac{2M}{R^3} + \frac{J}{R}, \quad (8.43)$$

$$\frac{dM}{dt} = -(d-2)JR\frac{dR}{dt}, \quad (8.44)$$

$$J = \frac{J_0}{R^d}. \quad (8.45)$$

Este conjunto puede simplificarse aún más integrando la segunda ecuación

$$M = \frac{J_0}{R^{d-2}} + M_0, \quad (8.46)$$

lo que nos deja con una ecuación de Newton para esta anchura

$$\frac{d^2R}{dt^2} = -\omega^2(t)R + \frac{M_0}{R^3} + \frac{2J_0}{R^{d+1}}. \quad (8.47)$$

Aquí, tanto M_0 como J_0 son constantes dependientes del dato inicial del problema.

Para contrastar la validez del método de momentos he estudiado numéricamente la evolución de soluciones exactas de la ecuación de Gross–Pitaevskii (2.14) con

simetría radial. Partiendo de un conjunto de datos iniciales cada vez más alejados del estado de equilibrio, y aplicando un método de Crank–Nicholson, he obtenido la evolución del radio cuadrático de las soluciones exactas, cuyas órbitas se comparan en la Figura 8.1(b) con los valores proporcionados por la aproximación de momentos independientes. El acuerdo entre ambos métodos es excelente, incluso en condiciones en las que la nube está completamente distorsionada y el método variacional carece de justificación. Como medida de la aproximación de momentos independientes, en la Figura 8.1(a) mostramos el valor de $J_0 = JR^d$. Si bien éste no permanece constante, las oscilaciones son tan pequeñas que parecen no jugar un papel relevante en la dinámica.

8.5.2 Cualquier número de dimensiones sin simetría

La aproximación de momentos independientes puede generalizarse a casos en los que la función de onda carece de simetría. Para ello partimos de las ecuaciones (8.14), realizando el cambio de variable habitual para eliminar los términos disipativos, y de nuevo introducimos el término no-lineal de la ecuación de Gross–Pitaevskii, $G(\rho) = \frac{1}{2}U\rho^2$.

$$\frac{dW_i}{dt} = B_i \quad (8.48a)$$

$$\frac{dB_i}{dt} = 4K_i - 2\omega_i^2 W_i - 2J \quad (8.48b)$$

$$\frac{dK_i}{dt} = -\frac{1}{2}\omega_i^2 B_i + \int \frac{U}{2}\rho^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (8.48c)$$

Aplicando la aproximación de momentos independientes modificamos las ecuaciones para la energía cinética introduciendo una nueva variable J

$$\frac{dK_i}{dt} = -\frac{1}{2}\omega_i^2 B_i + \frac{B_i}{W_i} J, \quad (8.49a)$$

$$\frac{dM_i}{dt} = \frac{1}{2}B_i J, \quad (8.49b)$$

$$J = \frac{J(0)}{\sqrt{W_1 \dots W_n}}. \quad (8.49c)$$

Por último, definiendo las anchuras cuadráticas medias como $x_i^2 = W_i$ obtenemos las conocidas ecuaciones de Newton para el paquete de ondas

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{2M_i}{x_i^3} - \omega_i^2 x_i + \frac{J}{x_i}, \quad (8.50a)$$

$$\frac{dM_i}{dt} = x_i \dot{x}_i J, \quad (8.50b)$$

$$J = \frac{J(0)}{x_1 \dots x_n}. \quad (8.50c)$$

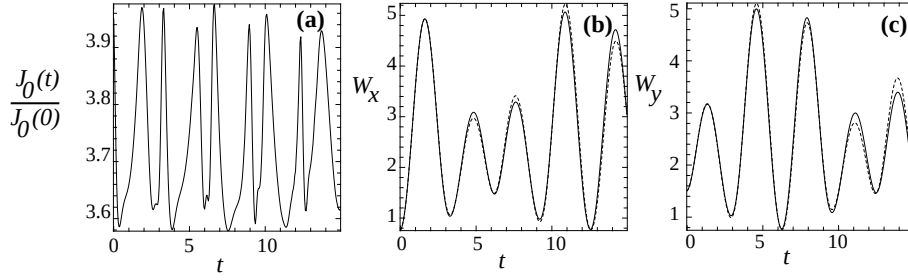


Fig. 8.2: Evolución de un paquete de ondas fuertemente distorsionado en dos dimensiones con término no-lineal $G(\rho) = \frac{1}{2}U\rho^2$. (a) Evolución de la cantidad $J_0 = J\sqrt{W_x W_y}$ para las soluciones exactas de la ecuación de Gross-Pitaevskii, mostrando que permanece constante en un 10%. (b-c) Evolución de las anchuras x^2 y y^2 dadas por las soluciones exactas de la ecuación de Gross-Pitaevskii (línea sólida) y por las ecuaciones de momentos (8.50) (línea de trazos).

Una vez más, en las Figuras 8.2(b-c) comparamos los resultados de dos conjuntos de simulaciones. El primero surge de simulaciones de la ecuación de Gross-Pitaevskii sin simetría radial empleando un método de Crank-Nicholson. El segundo conjunto de simulaciones lo obtuve aplicando las ecuaciones de momentos (8.47). El acuerdo entre ambos métodos es bastante bueno de nuevo, incluso cuando nos encontramos en un régimen de distorsión tan importante que las aproximaciones variacionales no están justificadas.

8.6 Conclusiones

En las secciones precedentes hemos mostrado diversas situaciones en las que podemos obtener ecuaciones diferenciales ordinarias cerradas que describen la evolución de algunos observables físicos. En algunos casos las simetrías del problema o su dimensionalidad permiten obtener estas ecuaciones de forma exacta, mientras que en otros debemos realizar aproximaciones razonables sobre la dinámica del paquete de ondas. En todos ellos llegamos a ecuaciones formalmente equivalentes a las proporcionadas por la aproximación variacional gaussiana (8.9). Así pues, en primer lugar el método de momentos puede entenderse como una fundamentación rigurosa para la aproximación variacional.

Además nos encontramos con que las ecuaciones de momentos (8.14) pueden simplificarse en un sólo paso reemplazando la función de ondas, $\psi(\mathbf{x})$, con un ansatz apropiado. En el caso conservativo, $\sigma = 0$, este procedimiento es equivalente al método de optimización de Ritz, con la ventaja de no tener que calcular integrales lagrangianas. En el caso disipativo, $\sigma \neq 0$, seguimos teniendo un método sistemático para construir ecuaciones aun cuando el sistema carece por completo

de densidad lagrangiana²

Finalmente el método de momentos es más fácilmente generalizable que la aproximación variacional. Un ansatz variacional con una fase del tipo (8.33) siempre llegará al mismo conjunto de ecuaciones que la aproximación de momentos independientes de primer orden. Por el contrario, mientras mejorar la aproximación variacional supone introducir expresiones de orden muy alto en la fase, mejorar la aproximación de momentos independientes supone únicamente introducir nuevas variables en las expresiones de los supermomentos.

² Existen procedimientos especulativos que dan lugar a principios variacionales en presencia de disipación, sin embargo carecen de una fundamentación rigurosa y únicamente funcionan en un conjunto reducido de problemas.

9. ESTABILIDAD BAJO PERTURBACIONES PERIÓDICAS

Resumen

En este capítulo demostramos la existencia de resonancias paramétricas extensas en una familia de ecuaciones de Schrödinger no lineales con potencial. A pesar del carácter altamente no lineal de estos sistemas, una modulación periódica sostenida del potencial da lugar a oscilaciones exponencialmente crecientes de las anchuras del paquete de ondas. Este resultado explica la periodicidad e intensidad de la respuesta de condensados de Bose–Einstein sometidos a perturbaciones de su confinamiento, incluso lejos del régimen casi–lineal en el que las perturbaciones pueden ser reducidas a modos. Además la existencia de soluciones exactas resonantes permite diseñar experimentos de focalización de paquetes de luz en guías de onda parabólicas.

9.1 Resonancias extensas

Cuando hablamos de resonancias solemos referirnos a una “respuesta anormalmente grande a una puede que pequeña perturbación”. El modelo más conocido de resonancia es el oscilador sin rozamiento con forzado externo periódico. En este sistema trivial es posible demostrar, para determinados tipos de forzado, la existencia de términos no acotados y linealmente crecientes en la solución. Un ejemplo más complicado de comportamiento resonante lo constituyen las resonancias paramétricas, donde es un parámetro relevante de la ecuación que resulta modulado y da lugar a la resonancia.

Las resonancias paramétricas se conocen desde la Edad Media [111] y su forma más sencilla la encontramos en el oscilador armónico cuando éste responde a la ecuación de Hill [82, 9]

$$\ddot{x} + p(t)x = 0, \quad (9.1)$$

o una versión particular conocida como ecuación de Mathieu

$$\ddot{x} + (1 + \varepsilon \cos \omega t)x = 0. \quad (9.2)$$

Como ambos son problemas lineales, es posible obtener mucha información sobre sus soluciones. Por ejemplo, podemos estudiar la ecuación de Mathieu utilizando la teoría de Floquet para ecuaciones con coeficientes periódicos y demostrar analíticamente la existencia de resonancias en determinadas regiones del espacio de parámetros (ε, ω) , incluso en condiciones de disipación lineal.

Sin embargo los fenómenos de resonancia no son exclusivos de los problemas lineales, sino que aparecen también en problemas no lineales de dimensión finita. Por ejemplo, en muchos sistemas hamiltonianos caóticos donde los toros resonantes constituyen el origen del caos, en osciladores de impacto y en resonancias nucleares magnéticas y de espín, etc. Por último nos encontramos con los problemas modelizados con ecuaciones en derivadas parciales. Aquí se conoce la existencia de resonancia en algunos problemas lineales, pero el estudio general de estos fenómenos sigue planteando muchas preguntas sin resolver

En este capítulo estudiaremos un sistema continuo que responde a la ecuación de Schrödinger no lineal

$$i\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}, t) + U|\psi|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t), \quad (9.3)$$

con un potencial armónico que depende del tiempo de forma periódica

$$V(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \sum \omega_i^2 \lambda_i(t)^2 x_i^2, \quad (9.4a)$$

$$\lambda_i(t)^2 = (1 + \varepsilon_i \cos \omega_i t). \quad (9.4b)$$

En este tipo de ecuaciones uno tiende a pensar que, como suele ocurrir, una perturbación resonante sólo puede excitar un número pequeño de modos del problema infinito-dimensional. Puesto que el término no lineal $U|\psi|^2$ mezcla diferentes modos, esta línea de razonamiento nos llevaría a pensar que la *resonancia se inhibe por medio de la transferencia de energía al resto de modos*, especialmente en el caso de sistemas conservativos donde las leyes de conservación controlan el número y amplitud de modos activos.

En los siguientes apartados demostraremos que *este razonamiento es erróneo y que las resonancias no acotadas son posibles en un modelo extenso* como la ecuación de Schrödinger no lineal con potencial (9.3). Definiremos como *resonancia extensa o extendida, al crecimiento no acotado* de una o más magnitudes medibles que involucran a la *totalidad del sistema continuo*. Utilizando las reducciones finito-dimensionales del Capítulo 8, demostraremos la existencia de resonancias extensas en la evolución del centro y las anchuras de un paquete de ondas gobernado por la ecuación (9.3).

Respecto a la aplicabilidad de estos resultados, la ecuación de Schrödinger no lineal con potencial armónico sirve para describir tanto un condensado de Bose-Einstein (§2.2.1) como la propagación de luz coherente en una guía de ondas parabólica. En el primer caso la existencia de resonancias explica la fuerte respuesta de la nube atómica incluso para los estímulos más débiles, y es interesante de cara al estudio de la dinámica de paquetes de ondas en condensados. En el segundo ejemplo, las resonancias se pueden utilizar para focalizar un haz de luz en una guía de ondas parabólica con respuesta no lineal, por medio de un mecanismo sencillo como es la alternancia de segmentos con distintos coeficientes Kerr [101].

9.2 Resonancias de Mathieu para el centro de masas

En este apartado demostraremos la existencia de resonancias fuertes en la evolución del centro de un paquete de ondas sometido al confinamiento armónico pulsante (9.4). Como probamos en §8.2, la evolución del centro de masas está

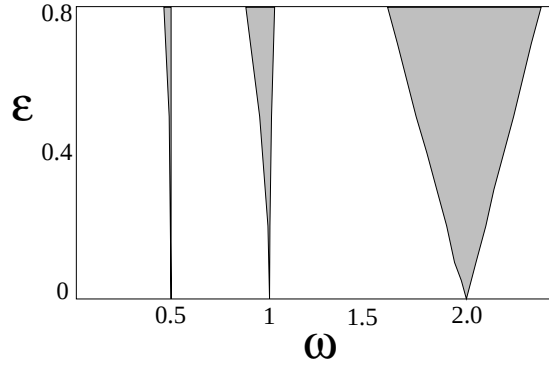


Fig. 9.1: Diagramas de estabilidad para la ecuación de Mathieu (9.2) en el plano $\epsilon - \omega$, con las primeras regiones de inestabilidad sombreadas.

regida por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias desacopladas (8.15)

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -\frac{1}{2} \omega^2 \lambda_x^2(t) \langle x \rangle, \quad (9.5a)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle y \rangle = -\frac{1}{2} \omega^2 \lambda_y^2(t) \langle y \rangle, \quad (9.5b)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle z \rangle = -\frac{1}{2} \omega^2 \lambda_z^2(t) \langle z \rangle. \quad (9.5c)$$

Cada una de estas ecuaciones responde al modelo conocido como ecuación de Mathieu (9.2), un problema que aparece de forma recurrente en el estudio de osciladores forzados paramétricamente y del que se puede obtener información por medios analíticos [11, 68, 125, 126].

Si suponemos que la perturbación $\lambda(t)$ depende de un parámetro $\lambda(t) = 1 + \tilde{\lambda}(t)$ donde $\tilde{\lambda}(t)$ es una función periódica con valor medio cero, frecuencia ω y valor máximo ϵ (no necesariamente pequeño), existe una toda una teoría que describe los intervalos donde las soluciones de (9.1) permanecen acotadas (intervalos de estabilidad) y las regiones donde las soluciones crecen sin control (intervalos de inestabilidad).

Los resultados más elementales se obtienen por medio de la teoría de Floquet para ecuaciones diferenciales ordinarias lineales con coeficientes periódicos dependientes del tiempo [68]. En este marco es posible demostrar que la ecuación (9.2) posee un conjunto infinito de regiones de inestabilidad en el parámetro de espacio, (ϵ, ω) . Las fronteras de estas zonas reciben en nombre de curvas características y su existencia se demuestra analíticamente: si $D(\epsilon, \omega)$ es el discriminante de la ecuación, las curvas características satisfacen las ecuaciones $D(\epsilon, \omega) = 2$ y $D(\epsilon, \omega) = -2$. La forma precisa de las regiones de inestabilidad se puede encontrar de forma numérica, comprobándose que tienen forma de cuñas apoyadas en los puntos $(\omega_{min}, \epsilon_{min}) = (2, 0), (1, 0), (2/3, 0) \dots$ y que se ensanchan a medida que incrementamos la intensidad de la perturbación, ϵ [Ver Figura 9.1]. En el inte-

rior de estas regiones al menos una solución crece con amplitud exponencialmente creciente.

Trabajando un poco más con la ecuación de Mathieu, bien por medio de desarrollos asintóticos o con la teoría de perturbaciones singulares, es posible localizar las resonancias y estudiar de forma aproximada las soluciones. Por ejemplo, para una frecuencia de perturbación lo bastante cerca de la primera resonancia, esto es, $|\omega - 2| = \delta = o(1)$, un método asintótico [11] proporciona la siguiente estimación

$$\begin{aligned} r &\simeq ce^{\sigma t} \cos(\omega t/2 + \theta_0), \\ \sigma &= \pm \sqrt{\frac{\epsilon^2}{4\omega^2} - \delta^2}. \end{aligned} \quad (9.6a)$$

Para algunos valores de δ y ϵ el exponente σ es un número real positivo y la amplitud de las oscilaciones crece sin límite. Un desarrollo de Taylor de segundo orden en (9.6a) proporciona los siguientes límites para la cuña de inestabilidad

$$|\omega - 2| \leq \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon^2}{32}. \quad (9.7)$$

Además la intensidad de la resonancia es máxima para un forzado del tipo

$$\delta_{max} = -1 + \sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{4}} \simeq -\epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^4). \quad (9.8)$$

El tratamiento de otras resonancias resulta más difícil porque implican términos de orden superior —al menos de segundo orden en el caso $\omega = 1$ —, dan lugar a regiones de influencia pequeñas y son menos intensas. En cualquier caso, a pesar de su carácter secundario, siguen jugando un papel importante cuando se estudia la eficiencia de la perturbación en términos de la velocidad de ganancia de energía [Figura 9.4].

Finalmente es importante señalar que las resonancias de Mathieu son de una naturaleza muy persistente: como comprobaremos en §9.4.3, resisten incluso la presencia de disipación, dando lugar de forma selectiva a la existencia de ciclos límite y resonancias desacotadas.

9.3 Evidencias numéricas de resonancias

9.3.1 Simetría radial

En esta parte del trabajo hemos estudiado numéricamente la existencia de resonancias sostenidas en la ecuación (9.3) toda vez que el potencial tiene simetría radial

$$V(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2}\omega_{\perp}^2(1 + \epsilon \cos \omega t)|\mathbf{r}|^2. \quad (9.9)$$

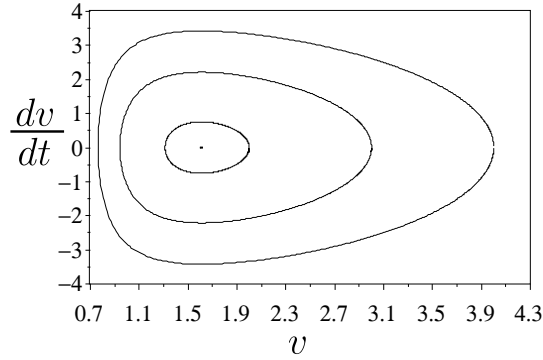


Fig. 9.2: Paquete de ondas con simetría radial ($P = 9.2$) descrito por las ecuaciones de momentos (9.11). Órbitas en el espacio de fase para oscilaciones de amplitud pequeña y grande, libres de perturbación externa ($\lambda(t) = \text{cte.}$).

Por un lado trabajaremos con soluciones exactas de la ecuación de Gross-Pitaevskii

$$i\hbar\partial_t u = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 u + \left\{ \frac{1}{2}m\nu^2\lambda^2(t)r^2 + 4\pi\frac{U_0 N}{4\pi}\frac{|u|^2}{r^2} \right\} u. \quad (9.10)$$

Y por otro estudiaremos las ecuaciones de momentos con la aproximación de momentos independientes. Este último método, que insistimos es aproximado, conduce a una ecuación de Hill singular para el radio cuadrático medio del paquete de ondas, $\nu(t)$,

$$\ddot{\nu} = -\lambda^2(t)\nu + \frac{1}{\nu^3} + \frac{P}{\nu^4}. \quad (9.11)$$

Los detalles de esta aproximación y los pasos necesarios para llegar hasta aquí se encuentran en la secciones §8.5.1 y §8.5.2.

Ambos modelos, (9.10) y (9.11), presentan dificultades a la hora de buscar soluciones numéricas. La razón estriba en la rigidez [55] de la evolución del paquete de ondas, que presenta intervalos de variación suave, $\nu \gg 0$, junto con escalas de tiempo extremadamente cortas en las que el radio cuadrático medio “colisiona” contra el origen. Este proceso es evidente en las Figuras 9.2 y 9.3.

Intentando evitar los problemas de rigidez, hemos resuelto las ecuaciones de momentos (9.11) empleando distintos métodos que incluyen un Runge–Kutta–Fehlberg de paso adaptativo, una pareja de Dormand–Prince de órdenes 4–5 [55], el resolutor de ecuaciones diferenciales ordinarias de Matlab [113] y el esquema conservativo de Luis Vázquez [95]¹. Todos los métodos proporcionaron resultados igual de precisos en cuanto a frecuencia de las oscilaciones, regiones de divergencia, etc.

¹ Esquema en diferencias finitas que conserva una versión discreta de la energía y que resulta incondicionalmente estable.

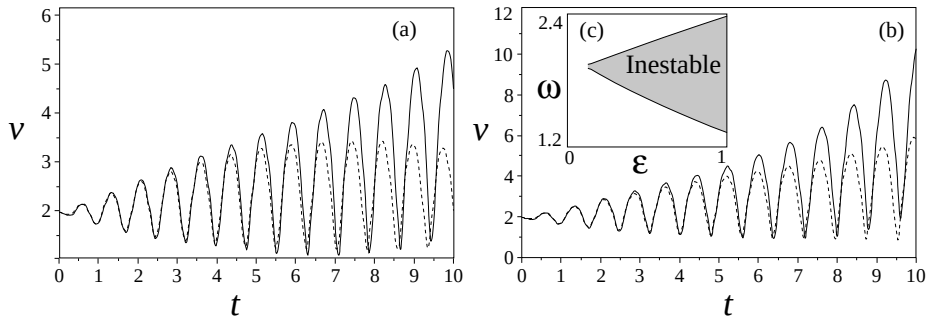


Fig. 9.3: Paquete de ondas con simetría radial sujeto a perturbaciones periódicas. Evolución de las ecuaciones de momentos (líneas a trazos) y de la ecuación de Schrödinger no lineal (línea continua) para las modulaciones (a) ($\epsilon = 0.15, \omega = 4.00$) y (b) ($\epsilon = 0.2, \omega = 4.00$). (c) Región de inestabilidad en el espacio de parámetros (ϵ, ω) obtenidas a partir de las ecuaciones de momentos.

Evitar los problemas de rigidez al simular la ecuación en derivadas parciales (9.10) es bastante más complicado. Nosotros hemos comparado soluciones de tres métodos, uno que emplea un método implícito “split-step” sobre una base de Fourier [114, 13]; una discretización de diferencias finitas implícita y simétrica respecto de inversión temporal [36]; un método de Crank–Nicholson implementado sobre la base de Fourier y un método de Crank–Nicholson implementado mediante diferencias finitas. En cualquier caso, incluso con el mejor de los procedimientos para integrar la ecuación respecto de la variable temporal, todas las técnicas se enfrentan a una dificultad seria que consiste en el tamaño finito de la discretización espacial. Este efecto resulta especialmente perjudicial en el caso de perturbaciones paramétricas por la posibilidad de que el paquete de ondas crezca de forma ilimitada. Consecuentemente, encontramos con que mientras la rigidez impone una cota superior a la discretización temporal, el tamaño de la malla impone una cota superior al tiempo durante el cual las simulaciones son fiables.

Con toda esta artillería computacional hemos obtenido diversos resultados. En primer lugar estudiamos las oscilaciones de baja amplitud en un potencial estacionario, $\epsilon = 0$. Partiendo del mismo dato inicial gaussiano, contrastamos las frecuencias de oscilación del paquete de ondas en la ecuación (9.10) con los modos normales de las ecuaciones de momentos (9.11), concluyendo que existe un acuerdo importante entre ambos modelos, como ya se mostró en [97].

También hemos estudiado las oscilaciones de gran amplitud del paquete de ondas, encontrando un acuerdo inesperadamente bueno entre la evolución del radio según la ecuación de momentos y según la ecuación en derivadas parciales, preciso en más de un 90% incluso en situaciones en las que la función de onda deja de ser autosimilar y desarrolla una o más inflexiones. Para este tipo de oscilaciones fuertes hemos confirmado también que la anchura experimenta fuertes rebotes contra el origen (Figura 9.2) con una periodicidad que se aleja de las frecuencias

linealizadas de [97] para aproximarse a la frecuencia propia de la trampa armónica, $\omega_{\perp}$.

Por último hemos simulado la respuesta del sistema a modulaciones periódicas del potencial

$$\lambda^2(t) = 1 + \epsilon \cos(\omega t). \quad (9.12)$$

Utilizando las ecuaciones de momentos (9.11) hemos rastreado el espacio de parámetros (ω, ϵ) , buscando regiones donde el radio diverge exponencialmente [Figura 9.3(a)]. Estas regiones de inestabilidad tienen forma de cuñas, apoyadas sobre una serie de puntos $(\omega_{min}, \epsilon_{min})$, y ensanchándose para valores crecientes de la amplitud ϵ . La resonancia más importante descansa sobre $\omega_{min} = 2.04$ [Figura 9.3(b)]; las otras dos, menos intensas, se encuentran sobre las frecuencias $\omega_{min} = 1.02$ y 0.68 . Realizando una amplia gama de experimentos numéricos hemos confirmado que estas frecuencias cambian muy poco con el parámetro no lineal, P , y no dependen del dato inicial. Ocurre justo lo contrario con la amplitud mínima ϵ_{min} para la que surgen las resonancias, pues ésta exhibe una fuerte dependencia respecto del dato inicial. Tanto que las resonancias más débiles, $\omega_{min} = 1.02$ y 0.68 , son incapaces de excitar el crecimiento de soluciones próximas a la de equilibrio.

Para buscar las mismas resonancias en la ecuación en derivadas parciales (9.10), hemos estudiado cómo varía la eficiencia del proceso de absorción de energía con la utilización de distintas modulaciones, (ϵ, ω) . La forma de medir esta “eficiencia” consiste en tomar como dato inicial un estado de equilibrio y estudiar cuanto ha crecido el radio de la función de ondas tras aplicar la modulación (9.12) durante un tiempo fijo. Los resultados se muestran en la Figura 9.4 para simulaciones de la ecuación diferencial ordinaria [Figuras 9.4(a-b)] y para simulaciones de la ecuación en derivadas parciales [Figuras 9.4(c-d)].

Aunque este último estudio no proporciona límites precisos de las regiones de inestabilidad, sí proporciona otros información relevante. El primero es que confirma el ensanchamiento de la región de inestabilidad para valores crecientes de la amplitud con que modulamos el potencial, ϵ . El segundo es el cambio de la frecuencia para la que la respuesta es máxima. Dicha frecuencia decrece a medida que intensificamos la perturbación, aproximándose a frecuencias múltiplos de $\omega_{\perp}$. Por último, resulta apreciable cómo la respuesta es mayor en la ecuación en derivadas parciales que en su simplificación finito–dimensional. Por ejemplo, existen amplitudes de perturbación que son incapaces de producir un crecimiento significativo del radio en (9.11), pero que excitan un crecimiento sostenido en la ecuación de Schrödinger (9.10). Esta discrepancia es achacable a la pérdida de información que supone la aproximación de momentos independientes §8.5.1.

9.3.2 Potenciales asimétricos

En ausencia de simetría seguimos teniendo una ecuación en derivadas parciales (9.3) junto con simplificaciones finito–dimensionales que nos dan pistas sobre la

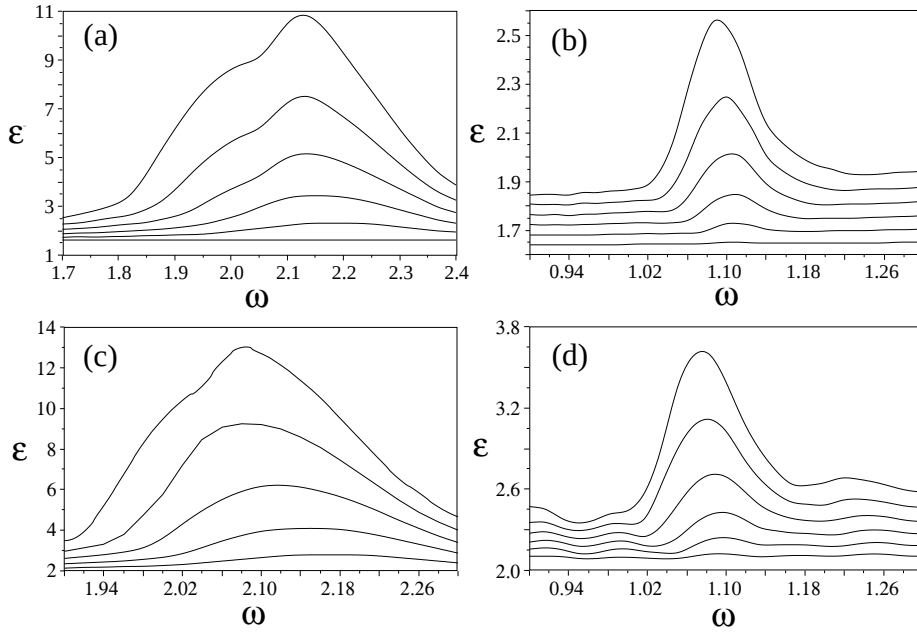


Fig. 9.4: Condensado radialmente simétrico con $P = 9.2$. Representamos la máxima amplitud de las oscilaciones tras aplicar una modulación periódica del potencial (9.12) durante 40 unidades de tiempo. El dato inicial es un dato de equilibrio. Cada gráfica corresponde a un valor de ϵ desde 0.05 hasta 0.3 en pasos de 0.05. Dibujamos la resonancia principal (a) y la segunda resonancia (b) de las ecuaciones de momentos, así como la primera (c) y segunda (d) resonancia de la ecuación de Schrödinger no lineal.

dinámica. En este caso las ecuaciones diferenciales ordinarias para las anchuras pueden provenir, bien de la aproximación de momentos independientes §8.5.2, bien del método variacional (8.9). En ambos casos una elección apropiada de unidades y variables nos conduce a ecuaciones de la forma

$$\ddot{v}_x + \lambda_x^2(t)v_x = \frac{1}{v_x^3} + \frac{P}{v_x^2 v_y v_z}, \quad (9.13a)$$

$$\ddot{v}_y + \lambda_y^2(t)v_y = \frac{1}{v_y^3} + \frac{P}{v_x v_y^2 v_z}, \quad (9.13b)$$

$$\ddot{v}_z + \lambda_z^2(t)v_z = \frac{1}{v_z^3} + \frac{P}{v_x v_y v_z^2}. \quad (9.13c)$$

Mientras que la ecuación diferencial ordinaria puede ser integrada con los mismos métodos del apartado anterior, la ecuación de Gross–Pitaevskii en tres dimensiones requiere de métodos más precisos y computacionalmente más eficientes que un sencillo esquema de diferencias finitas. En este caso nosotros optamos por utilizar un método pseudoespectral de Fourier definido sobre un mallado rectangular

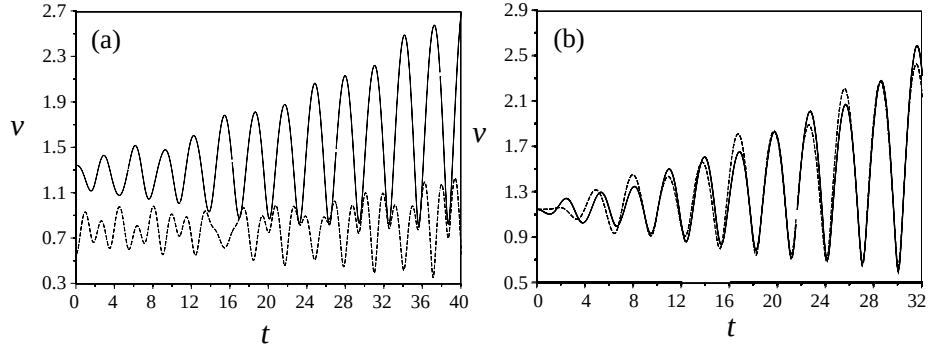


Fig. 9.5: Evolución de un condensado sometido a una perturbación $m = 0$ resonante, $(\omega_r, \epsilon_r) = (2.00, 0.15)$. Mostramos las anchuras radial, v_r (línea continua) y axial v_z (línea de trazos) para (a) una trampa con simetría cilíndrica, ($P = 9.2, \omega_{x,y} = 1, \omega_z = 2$), y (b) para una trampa con simetría esférica ($P = 9.2, \omega_x = \omega_y = \omega_z = 1$).

uniforme con 108^3 puntos, integrando temporalmente con un método “split-step” simétrico de segundo orden [114, 13]. Como lo demuestran las simulaciones temporales con trampas estacionarias y con trampas esféricamente simétricas, se trata de un esquema numérico que funciona extremadamente bien a tiempos largos. Sin embargo, al igual que ocurre con todos los métodos numéricos, de nuevo nos encontramos con una limitación en el tiempo durante el cual podemos simular las resonancias; límite que se debe enteramente a la densidad y el tamaño de la discretización espacial.

Con este método hemos estudiado las que se conocen como perturbaciones monopulares y dipolares del potencial. El primer tipo de perturbaciones recibe el nombre de perturbaciones $m = 0$ y corresponde a la elección $(\epsilon_x = \epsilon_y, \epsilon_z = 0)$, mientras que las perturbaciones $m = 2$ o dipolares la forman oscilaciones en contrafase de las anchuras X e Y , $(\epsilon_x = -\epsilon_y, \epsilon_z = 0)$. Este tipo de modulaciones corresponde a experimentos realizados con condensados de Bose–Einstein [67], donde una preparación resonante precede al estudio de las oscilaciones de las anchuras del condensado y su amortiguación. Mientras que una modulación $m = 2$ apenas induce rotaciones de la función de onda, en el caso $m = 0$ hemos encontrado al menos una región de resonancia donde predicen las ecuaciones finito dimensionales. Las figuras 9.5(a-b) muestran dos ejemplos del tipo de evolución que hemos encontrado en las regiones resonantes.

De nuevo apreciamos una respuesta resonante algo más intensa en la ecuación de Gross–Pitaevskii (9.3) que en las ecuaciones de momentos. Éste y otros resultados similares del caso radial §9.3.1 apuntan hacia una interpretación teórica según la cual la ecuación (9.3) tendría infinitos modos que participan en el proceso de absorción de energía sin interferir en la evolución de las anchuras. Por un lado la presencia de un número infinito de modos resonantes implica más grados de libertad resonantes y una mayor respuesta que en el modelo finito-dimensional. Pero por

otro lado, para existencia de esta estructura resonante “en escalera” necesitamos un subconjunto infinito de estados estacionarios con energías aproximadamente equiespaciadas según la frecuencia principal de la resonancia, $E_m - E_n \propto \hbar\omega$. Este punto ha sido confirmado en las simetrías más sencillas resolviendo directamente [44] la ecuación de Gross–Pitaevskii estacionaria (2.29) (Véase el Capítulo §3).

9.4 Análisis de las ecuaciones de momentos

9.4.1 Resonancias exactas en problemas bidimensionales

En la ecuación de Gross–Pitaevskii bidimensional con un potencial radialmente simétrico, el método de momentos nos proporciona una ecuación diferencial ordinaria **exacta** para la anchura del paquete de ondas

$$\frac{d^2 R}{dt^2} = -\omega^2 \lambda(t) R + \frac{2M}{R^3}. \quad (9.14)$$

Esta ecuación es una ecuación de Hill con un término singular. En general las ecuaciones de esta forma no pueden ser resueltas explícitamente, sin embargo este caso particular posee soluciones exactas [51, 103]

$$X(t) = \sqrt{u^2(t) + \frac{Q}{W^2} v^2(t)}, \quad (9.15)$$

que se expresan como combinación no lineal de dos soluciones de la ecuación de Mathieu

$$\ddot{u} + \omega^2 \lambda(t) u = 0, \quad u(t_0) = X(t_0), \dot{u}(t_0) = \dot{X}(t_0), \quad (9.16a)$$

$$\ddot{v} + \omega^2 \lambda(t) v = 0, \quad v(t_0) = 0, \dot{v}(t_0) \neq 0, \quad (9.16b)$$

y de su wronskiano $W = u\dot{v} - \dot{u}v = \text{cte.} \neq 0$.

De la relación (9.15) se deduce que si una perturbación $\lambda(t)$ es capaz de inducir el crecimiento exponencial de las soluciones $u(t)$ y $v(t)$ entonces esta misma modulación dará lugar a una inestabilidad paramétrica extensa en las ecuaciones de momentos (9.14) y en la ecuación en derivadas parciales (9.3). Queda demostrado por tanto que el comportamiento resonante existe al menos en el caso bidimensional con simetría radial. Por la naturaleza de las soluciones, estas resonancias sólo dependen de la dependencia temporal del potencial, $\lambda(t)$, y más en concreto de los parámetros (ϵ, ω) .

Una aplicación práctica de las soluciones exactas bidimensionales (9.15) consiste en diseñar una modulación no trivial que manipule el paquete de ondas a nuestra voluntad. Esto es posible en experimentos con condensados de Bose–Einstein en los que se controla el potencial confinante, y también en Óptica mediante el control preciso del perfil del índice de refracción en una guía de ondas. Por ejemplo, en el caso particular en que la perturbación $\lambda(t)$ corresponde a intercalar segmentos con índices de refracción distintos es posible encontrar expresiones analíticas

para $u(t)$ y $v(t)$ y de esta forma diseñar un experimento de focalización de un haz guiado [101].

Mientras que en configuraciones bidimensionales con simetría radial somos capaces de encontrar soluciones y ofrecer resultados analíticos sobre la existencia de resonancias, en otras geometrías y dimensionalidades nuestra capacidad predictiva es limitada y depende en gran medida de la simulación numérica de las ecuaciones completas (9.3) y de reducciones finito-dimensionales aproximadas (8.50). En los siguientes apartados presentaremos evidencias numéricas y argumentos cualitativos sobre la existencia de resonancias en estos problemas más complejos.

9.4.2 Resonancias de barrera

Mientras que en dos dimensiones con simetría radial las ecuaciones de momentos son exactas y resolubles, en dimensiones mayores la evolución de las anchuras no es integrable. Olvidando por un momento que en este contexto las ecuaciones de momentos son sólo buenas aproximaciones, intentaremos justificar la presencia de resonancias en las ecuaciones tridimensionales.

Para ello basta con darse cuenta de que tanto la ecuación (9.11) como (9.13) responden al mismo formato de ecuación de Hill con un término repulsivo altamente singular, $\propto 1/R^{-3}$. Este término es, de hecho, el responsable de la rigidez de las ecuaciones diferenciales ordinarias y resulta intuitivamente atractivo reemplazarlo con una barrera de potencial infinita sobre los planos de anchura cero. El resultado de semejante cambio es un *oscilador de impacto* en el que las anchuras describen la evolución de una partícula equivalente, sometida a forzado paramétrico y confinada por una serie de paredes fijas sobre las que ésta rebota. La conexión entre potenciales singulares diferenciables y los osciladores de impacto ha sido fruto de amplio estudio y aplicación en situaciones de la vida real, tanto en Física como en Ingeniería².

Por ejemplo, en el problema con simetría radial (9.11), la aplicación de las condiciones de contorno elásticas conduce a ecuaciones del estilo

$$\ddot{v} + \lambda^2(t)v = 0, \quad (9.17)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_c^-} (v, \dot{v}) = (0^+, V_c) \iff \lim_{t \rightarrow t_c^+} (v, \dot{v}) = (0^+, -V_c).$$

En estas ecuaciones t_c denota cualquier instante en el que la anchura rebota contra la singularidad $v = 0$.

Esta ecuación es matemáticamente equivalente a un oscilador elástico *sin condiciones de barrera*. Introduciendo una variable nueva, u , que pueda moverse sobre toda la recta real, y efectuando el cambio de variables

$$v = |u|, \quad (9.18)$$

resulta evidente que cada solución de la ecuación (9.2) proporciona una solución de (9.17). Y viceversa, con un cambio de signo apropiado entre intervalos, es

² Véase [126, 125] para una breve introducción y una lista de referencias.

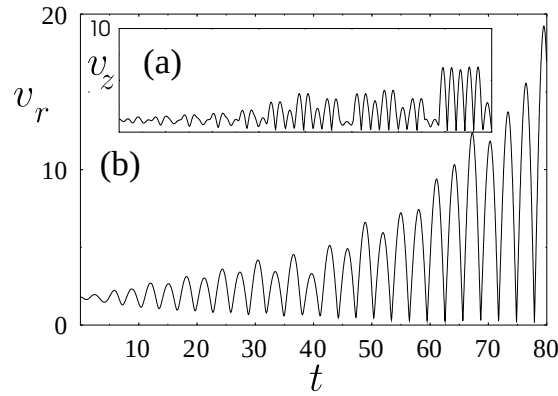


Fig. 9.6: Evolución de un condensado con simetría cilíndrica (modelo variacional, $P = 9.2$) sometido a una perturbación senoidal $(\omega, \epsilon) = (2.04, 0.1)$ de la anchura radial de la trampa. Se muestran las dimensiones (a) radial v_r y (b) axial v_z en función del tiempo.

posible convertir cada solución de (9.17) en una única solución diferenciable de (9.2).

La conexión entre la ecuación para el radio del paquete de ondas (9.11) y la ecuación de Mathieu (9.2), implica que en el régimen de oscilaciones de gran amplitud, donde la aproximación de barrera es particularmente buena, el sistema presentará regiones de inestabilidad más o menos centradas sobre las frecuencias $\omega = 2, 1, 1/3, \dots$. Esta predicción se confirma de hecho en las simulaciones numéricas §9.3.1.

En ausencia de simetría radial sigue siendo posible reemplazar los términos singulares con barreras de potencial infinitas, con el resultado inmediato de encontrar múltiples regiones de inestabilidad, resultante de combinar las relaciones

$$\frac{\omega_{\eta, \min}}{\lambda_{0\eta}} = 2, 1, 2/3, \dots \quad (9.19)$$

Las simulaciones numéricas del modo $m = 0$ de hecho confirman esta predicción con una precisión relativa del 0.5% en las frecuencias. En la figura 9.6 mostramos una de estas evoluciones resonantes.

El problema con la eliminación de los términos singulares en (9.13) es que de esa forma suprimimos también el acoplo entre anchuras. Así, mientras el modelo de oscilador de impacto predice una respuesta resonante para modulaciones $m = 2$, el acoplo entre anchuras inhibe estas resonancias y limita la evolución de la función de ondas a una rotación.

9.4.3 Disipación

Queremos ahora estudiar el efecto de un término disipativo en las ecuaciones finito-dimensionales que modele un posible amortiguamiento de las oscilaciones

de la anchura del paquete de ondas. Como resulta muy difícil la introducción de modificaciones en (9.3) para tener en cuenta estos fenómenos disipativos, nos limitaremos a introducir fenomenológicamente un amortiguamiento viscoso lineal en (9.11). Esta elección introduce una pérdida de energía significativa manteniendo la normalización del paquete de ondas, que no suele cambiar mucho en las aplicaciones prácticas³. En esta sección demostraremos que las resonancias de Mathieu persisten tras la inclusión del amortiguamiento.

Cuando añadimos la disipación viscosa a la ecuación (9.11) y aplicamos la aproximación de oscilador de impacto, de nuevo llegamos a una ecuación diferencial ordinaria lineal

$$\ddot{u} + (1 + \epsilon \cos(\omega t))u + \gamma \dot{u} = 0. \quad (9.20)$$

El término $\gamma \dot{u}$ es una contribución fenomenológica a un modelo por otra parte exacto. La justificación del mismo la encontramos en los experimentos [67], donde encontramos un amortiguamiento exponencial de las oscilaciones del condensado en escalas de tiempo mucho más cortas que las implicadas en fenómenos de pérdida de átomos. Desde el punto de vista teórico se sospecha de dicho amortiguamiento surge de la interacción entre los átomos del condensado y la nube térmica, una interacción que por ahora no ha podido ser reducida (de forma rigurosa, claro está) a modelos teóricos sencillos.

Mediante el cambio de variables $u(t) = \rho(t)e^{-\gamma t}$ el término disipativo desaparece, recuperando la forma de una ecuación de Mathieu

$$\ddot{\rho} + (1 - \gamma^2 + \epsilon \cos(\omega t))\rho = 0. \quad (9.21)$$

La introducción del amortiguamiento desplaza las resonancias a valores inferiores de la frecuencia

$$\frac{\omega}{\sqrt{1 - \gamma^2}} = 2, 1, 2/3 \dots \quad (9.22)$$

donde $\nu^2(\gamma) = 1 - \gamma^2$ es la nueva frecuencia efectiva del potencial armónico.

Podemos resolver de forma aproximada la ecuación amortiguada (9.21) alrededor de la primera resonancia, obteniendo

$$x(t) \simeq ce^{(\sigma - \gamma)t} \cos\left(\frac{\omega t}{2} + \theta_0\right), \quad (9.23)$$

donde λ responde de nuevo a la ecuación (9.6a). Esta solución nos muestra que las regiones de resonancia en el espacio de parámetros están restringidas a valores de (ϵ, ω) para los que la intensidad de la resonancia, λ , es mayor que la fuerza

³ Este efecto aparece, por ejemplo, en los condensados de Bose–Einstein gaseosos, por la interacción entre la función de onda macroscópica y la fracción de átomos no condensados. Sin embargo el tiempo característico de amortiguación de la anchura es mucho menor que la vida del condensado y a lo largo de la evolución la norma, N , o número de partículas, permanece casi constante.

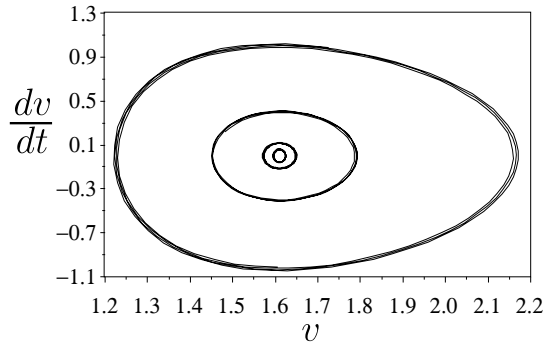


Fig. 9.7: Evolución de un paquete de ondas con simetría radial sujeto a amortiguamiento lineal y forzado paramétrico. Las características del problema son $P = 9.2$, $\gamma = 0.15$, $\epsilon = 0.1$, y frecuencias $\omega = 2.15, 2.4, 3.0, 4.0$ (desde el ciclo más pequeño hasta el exterior).

del término disipativo. Las nuevas cuñas de inestabilidad se apoyan sobre un ϵ_{min} mayor, distinto de cero, y son más estrechas, pero no desaparecen a menos que el amortiguamiento γ resulte excesivo.

El desplazamiento de las resonancias se reproduce en las simulaciones numéricas de las ecuaciones de momentos sin la aproximación de impacto. Por ejemplo, adoptando las medidas experimentales [67] del amortiguamiento en un condensado obtenemos $\gamma \sim 0.15$ en unidades apropiadas. Este amortiguamiento eleva ϵ_{min} hasta 0.18 para una auto-interacción $P = 9.2$. Así pues, la inestabilidad ahora no surge a menos que la amplitud de la perturbación sea superior al 20%.

Un segundo efecto interesante del amortiguamiento consiste en que la evolución fuera de las regiones de resonancias resulta más ordenada que en caso conservativo, debido a la existencia de un ciclo límite *sincronizado con la frecuencia de la perturbación paramétrica* y cuyo tamaño depende únicamente de los parámetros de la perturbación, (ω, ϵ) . En la Figura 9.7 mostramos distintos ciclos límites que aparecen con las perturbaciones periódicas. Como es de esperar, el máximo tamaño se alcanza con la frecuencia de bombeo más eficiente, dada por la figura 9.4.

Finalmente queremos resaltar que la aparición de ciclos límites abre la puerta a toda una familia de nuevos fenómenos, desde evolución caótica hasta teoría de bifurcaciones [126, 125]. Este ciclo límite no es exclusivo del amortiguamiento lineal y esperamos que aparezca en modelos más realistas de condensados de Bose–Einstein, por ejemplo. Por último, la dependencia de tamaño del ciclo límite puede tener aplicación en condensación de Bose–Einstein para expulsar la nube no condensada fuera de la trampa.

9.5 Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado un sistema no lineal extendido sometido a perturbación paramétrica. Este sistema, modelizado en base a ecuaciones de Schrödinger no lineales con potencial, tiene aplicaciones en condensación de Bose–Einstein y en el campo de guías de onda con índices de refracción parabólicos.

Aplicando el método de momentos en esta familia de problemas, hemos demostrado de forma rigurosa la existencia de resonancias extensas en el movimiento del centro de masas y en las anchuras de problemas bidimensionales con simetría cilíndrica. Estas resonancias inducen oscilaciones de amplitud exponencialmente creciente en el sistema, en las que participan los valores de la solución sobre todo el espacio, y que persisten en tanto mantengamos la perturbación paramétrica. Se trata de un resultado altamente no trivial dado el carácter extenso y conservativo de estos modelos, que tradicionalmente ha llevado a pensar en algún tipo de mecanismo que suprima la resonancia para oscilaciones lo bastante grandes.

La aproximación de momentos independientes, así como un conjunto exhaustivo de simulaciones numéricas y modelos fenomenológicos nos permiten plantear dos conjeturas razonables. La primera es que las resonancias extensas deben aparecer también en sistemas de mayor dimensionalidad, lo que explicaría la alta respuesta de un condensado de Bose–Einstein a perturbaciones periódicas. La segunda conjetura es que al introducir mecanismos disipativos en estos modelos las resonancias deberían traducirse en ciclos límites, oscilaciones de amplitud sostenida dependiente de la intensidad de la perturbación. Ambas conjeturas permanecen sin demostrar y representan dos de las múltiples vías de ampliación de este trabajo.

10. ENERGÍA LIBRE NO LINEAL Y GRADIENTES DE SOBOLEV

Resumen

En este capítulo se desarrolla la aplicación de los gradientes de Sobolev al problema de minimizar diversos funcionales de Schrödinger relacionados con problemas de Mecánica Cuántica y Óptica no-lineal que de otro modo serían difíciles de resolver. Demostraremos que el gradiente de Sobolev es una forma precondicionada de las elecciones tradicionales para las direcciones de descenso en distintos métodos de optimización. Además encontraremos un medio computacionalmente eficiente para calcularlos en término de la base de Fourier discreta y la transformada de Fourier rápida (FFT). Por último compararemos diversas técnicas de minimización con y sin el precondicionamiento de Sobolev, mostrando que éste proporciona una mejora importante de la convergencia, que resulta imprescindible para problemas con muchos de grados de libertad. En las conclusiones mostraremos cómo generalizar el método de gradientes de Sobolev empleando operadores lineales arbitrarios.

10.1 Introducción

El estudio de la Naturaleza nos muestra que muchos sistemas continuos libres de forzado tienden a adoptar configuraciones estacionarias, en las que las distribuciones de masa, carga, velocidad, etc, permanecen invariantes en el tiempo. En el lenguaje del modelado matemático de estos problemas cada configuración del sistema se representa con un punto en un espacio de funciones, $\psi(\mathbf{x}) \in W$, mientras que la tendencia del sistema continuo a reposar en alguno de estos estados viene dada por un funcional, $E(\psi) : W \rightarrow \mathbb{R}$, la *energía*, cuyos mínimos son los estados estacionarios.

Así, es frecuente encontrar muchos problemas físicos escritos como principios variacionales del tipo “encuéntrese los estados fundamentales ψ en el espacio de funciones W tales que la energía $E(\psi) : W \rightarrow \mathbb{R}$ alcanza un mínimo sobre ellos”. En estos casos el funcional que debe ser minimizado suele adoptar una expresión aparente sencilla en términos de integrales la función ψ y de sus derivadas,

$$E(\psi) = \int f(\nabla\psi(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{x})) d^n x. \quad (10.1)$$

Sin embargo una descripción analítica completa de los mínimos de la ecuación (10.1) suele ser imposible, de manera que la ventaja de los principios variacionales radica no tanto en la posibilidad de extraer soluciones explícitas, sino en la caracterización numérica de las soluciones.

En este trabajo [46] presentaremos diferentes procedimientos para el estudio numérico de los puntos críticos del funcional de energía (10.1), centrándonos principalmente en la minimización de dicho funcional *sujeto a restricciones* físicas. Desde un punto de vista práctico, la minimización del funcional de energía es similar a la búsqueda de mínimos de una función real definida sobre un espacio finito-dimensional. Primero hemos de escoger una definición de derivada, $\nabla E(\psi)$, acorde con el espacio vectorial sobre el que trabajemos. En segundo lugar hemos

de utilizar estas derivadas para construir algoritmos de descenso que converjan hacia los puntos críticos y que tengan en cuenta las restricciones. Por último hay que considerar detalles prácticos de implementación y eficiencia.

De estos tres pasos, el más delicado es la construcción de la derivada. Si el dominio del funcional, W , está equipado con un producto escalar, suele ser conveniente adoptar la derivada de Frechet. Esta definición surge de un desarrollo a primer orden del funcional alrededor de un punto, ψ

$$E(\psi + \delta) = E(\psi) + \langle \delta, \nabla E(\psi) \rangle + \langle \nabla E(\psi), \delta \rangle + O(\|\delta\|^2). \quad (10.2)$$

La derivada primera del funcional es el operador $\nabla E(\psi)$ que aparece en los términos de primer orden respecto de la perturbación δ . En este contexto, los *puntos críticos*, ψ_c , se definen como los elementos sobre los que la variación del funcional se anula a primer orden para cualquier perturbación. O, en otras palabras, sobre un punto crítico la derivada del funcional sea anula en el sentido débil

$$\langle \delta, \nabla E(\psi_c) \rangle = 0, \quad \forall \delta. \quad (10.3)$$

Igual que en el caso finito-dimensional, a partir de la derivada de Frechet es posible demostrar que cualquier mínimo del funcional es también un punto crítico. De ahí que resulte una práctica común resolver la ecuación (10.3) y verificar *a posteriori* qué soluciones son mínimos locales y cuales no. Por ejemplo, si trabajamos sobre $W = L^2(\mathbb{R}^n)$, este procedimiento nos lleva a las ecuaciones de Euler-Lagrange, un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales de la forma

$$\frac{\partial f}{\partial \psi} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial \nabla \psi} = 0. \quad (10.4)$$

El problema con estas ecuaciones es que en general resulta tan difícil encontrar soluciones de (10.4) y discriminar los auténticos mínimos, como encontrar numéricamente los puntos críticos del funcional de partida (10.1).

Así pues en lo que sigue nosotros optaremos por diseñar sucesiones, $\{\psi_i\}$, que converjan a un mínimo del funcional: $\psi_c = \lim_{i \rightarrow \infty} \psi_i$. En §10.2 precisaremos el tipo de funcionales con el que trabajaremos, su dominio de definición, las características de estos espacios y obtendremos la definición del gradiente, al que nos referiremos como *gradiente de Sobolev*. Después, en §10.3 obtendremos una expresión para este gradiente en términos de modos de Fourier y la transformada de Fourier rápida (FFT). Finalmente en §10.4 y §10.5 aplicaremos estas técnicas a la búsqueda de estados fundamentales y ondas solitarias en condensados de Bose-Einstein y en propagación de luz por un medio de no-linealidad saturable. Ambos sistemas físicos responden a modelos basados en ecuaciones de Schrödinger no-lineales y presentan dificultades insalvables cuando se aplican técnicas de minimización tradicionales.

10.2 Gradientes de Sobolev

10.2.1 Soluciones directas del problema variacional

Existen dos aproximaciones tradicionales al problema de la minimización de un funcional en una base discreta. La primera alternativa estima la función incógnita en una base ortonormal, $\{\phi_k\}$, para un subespacio del dominio de definición,

$$\psi = \sum_{k=1}^N c_k \phi_k,$$

obteniendo de esa forma un nuevo funcional ahora definido sobre un conjunto finito de grados de libertad, sean estos reales o complejos,

$$E(\{c_k\}) \equiv E\left(\sum c_k \phi_k\right). \quad (10.5)$$

A partir de aquí existen a nuestra disposición toda una artillería de técnicas numéricas para la minimización entre las que destacan el método de Newton y el gradiente conjugado no-lineal.

Si bien este procedimiento destaca por su simplicidad y por la abundante literatura disponible al respecto, existe una amplia familia de problemas no-lineales en los que esta técnica da lugar a expresiones demasiado complicadas y computacionalmente costosas como para tenerlas en cuenta. Para estos problemas existe una segunda alternativa conocida como *técnicas de descenso*. La idea base es manipular el funcional de partida (10.1) para obtener un ecuaciones que describan trayectorias minimizantes en el espacio de trabajo, W . Estas ecuaciones son luego discretizadas y resueltas en una base apropiada.

Las dos técnicas de descenso más conocidas son *el descenso rápido continuo* y *el descenso rápido discreto*. En la primera versión trabajamos con una trayectoria minimizante continua, $\psi(t) : \mathbb{R} \rightarrow W$, definida por una ecuación en derivadas parciales (EDP) que involucra el gradiente del funcional (10.2).

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\nabla E. \quad (10.6)$$

El descenso rápido discreto, por otro lado, es una técnica computacionalmente más sencilla de implementar puesto en lugar de requerir la integración de una EDP, construye la sucesión

$$\psi_{k+1} = \psi_k + \lambda_k \nabla E(\psi_k) \quad (10.7)$$

minimizando localmente la función $E(\psi_k + \lambda \nabla E)$ respecto de la variable real λ .

En este capítulo trabajaremos únicamente con técnicas de descenso y no con funcionales descritos sobre bases finitas. La razón principal es que buscamos la definición de $\nabla E(\psi_k)$ que proporciona la mejor convergencia para nuestros problemas. Como se mostró en el trabajo de J. W. Neuberger, una elección

acertada puede significar una mejora de varios órdenes de magnitud en los pasos y operaciones empleados. Además los procedimientos que obtenemos son fácilmente generalizables a otros algoritmos de descenso como el gradiente conjugado no-lineal, que ajusta dinámicamente la dirección de descenso $-d_k \equiv \nabla E(\psi_k)$ a partir de la historia del procedimiento minimizador. Por último, el trabajar con algoritmos de descenso nos evitará los complejos términos no-lineales que surgen al emplear otras técnicas [44], a la vez que dispondremos de mayor variedad de bases de Fourier con las que poder trabajar.

10.2.2 Gradientes ordinarios

Aunque no siempre está justificado, resulta habitual en la literatura especializada trabajar en espacios de funciones equipados con el producto escalar de L^2 y su norma asociada

$$\langle \psi, \phi \rangle_{L^2} \equiv \int \bar{\psi} \phi, \quad (10.8)$$

$$\|\psi\|_{L^2}^2 \equiv \int |\psi|^2. \quad (10.9)$$

Con esta elección y trabajando sobre la ecuación (10.2), la definición formal del gradiente es la obtenida por Lagrange

$$\nabla E(\psi) = \frac{\partial E}{\partial \psi} - \nabla \frac{\partial E}{\partial (\nabla \bar{\psi})}. \quad (10.10)$$

En lo sucesivo nos referiremos a esta definición como “gradiente ordinario” para diferenciarlo de otras definiciones más precisas que encontraremos.

10.2.3 Gradientes de Sobolev

Siguiendo las ideas de la referencia [91] plantearemos nuestro problema variacional sobre un espacio diferente: el espacio de Sobolev $\mathbb{H}^1$ constituido por funciones tales que ellas y sus derivadas sean integrables en L^2 :

$$\mathbb{H}^1 \equiv \{\psi / \psi, \nabla \psi \in L^2\}. \quad (10.11)$$

Normalmente deberíamos añadir el requisito de que las funciones ψ se anulen en la frontera de su dominio, sin embargo en lo que resta de este trabajo las funciones estarán definidas sobre todo el espacio $\mathbb{R}$ por lo que esta condición surge de manera natural. Por último debemos recordar que el espacio de Sobolev está equipado con un producto escalar y una norma

$$\langle \psi, \phi \rangle \equiv \int [\bar{\psi}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) + \nabla \bar{\psi}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x})] d^n x, \quad (10.12)$$

$$\|\psi\|^2 \equiv \int [|\psi|^2 + |\nabla \psi|^2] d^n x. \quad (10.13)$$

La definición del gradiente del funcional (10.1) en $\mathbb{H}^1$ la obtendremos de forma menos rigurosa que en [92]. Realizando la expansión de Frechet para el funcional alrededor de un estado ψ llegamos las siguientes integrales

$$E(\psi + \varepsilon \delta) = E(\psi) + \varepsilon \int \overline{(\delta, \nabla \delta)} \left(\frac{\partial E}{\partial \psi} \right) + c.c. + O(\varepsilon^2). \quad (10.14)$$

Debemos convertir esta expresión en algo similar a (10.2) para identificar la derivada $\nabla E(\psi)$. Por tanto buscamos una función ϕ tal que la igualdad

$$\int \left[\bar{\delta} \frac{\partial E}{\partial \psi} + \nabla \bar{\delta} \frac{\partial E}{\partial (\nabla \psi)} \right] + c.c. = \int [\bar{\delta} \phi + \nabla \bar{\delta} \nabla \phi] + c.c. \quad (10.15)$$

se satisfaga para toda perturbación δ . Integrando por partes la expresión anterior llegamos a una solución formal del problema en términos de la ecuación de Poisson

$$(1 - \Delta) \phi = \frac{\partial E}{\partial \psi} - \nabla \frac{\partial E}{\partial (\nabla \psi)}. \quad (10.16)$$

Así pues, nuestro gradiente de Sobolev para el funcional $E(\psi)$ finalmente es

$$\nabla_S E \equiv (1 - \Delta)^{-1} \nabla E, \quad (10.17)$$

donde $\nabla_S E$ representa al gradiente de Sobolev, ∇E es el gradiente ordinario y $(1 - \Delta)^{-1}$ es el inverso de un operador lineal estrictamente definido positivo que actúa de preconditionador sobre el gradiente ordinario.

10.2.4 Gradientes de Sobolev generalizados

Hemos demostrado que la redefinición del gradiente en términos de otro producto escalar supone algún tipo de preconditionamiento sobre la dirección de descenso original, ∇E . Supongamos que nuestro funcional es de la forma siguiente

$$E(\psi) = \int \bar{\psi} A \psi + f(|\psi|^2, \mathbf{x}), \quad (10.18)$$

con un término lineal A que es una forma cuadrática simétrica y definida positiva ($A|_H \geq 0$). Supongamos también que el dominio de definición de E está contenido en un espacio vectorial, H , equipado con el siguiente producto escalar

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int \bar{\psi} (1 + A) \phi. \quad (10.19)$$

Dicho producto escalar aparece de forma natural en el funcional de energía

$$E(\psi) = \langle \psi, \psi \rangle + \int f(|\psi|^2, \mathbf{x}) - |\psi|^2. \quad (10.20)$$

de manera que el nuevo gradiente de Sobolev en H

$$\nabla_A E = \psi + (1 + A)^{-1} [\partial_1 f - \psi], \quad (10.21)$$

adquiere la expresión habitual en términos del gradiente ordinario, $\nabla E = A\psi + \partial_1 f$, y un preconditionador

$$\nabla_A E = (1 + A)^{-1} \nabla E. \quad (10.22)$$

Podemos pensar que la elección idónea del producto escalar será aquella que convierta la parte lineal del funcional de energía en una forma cuadrática, $\langle \psi, B\psi \rangle$, donde el operador B sea próximo a la unidad —en el ejemplo que hemos planteado de hecho así es, $B\psi = \psi$ —. Es de esperar además que el preconditionamiento tenga un efecto suavizador sobre la componente no lineal mejorando la convergencia. En las aplicaciones numéricas §10.4 y §10.5 presentaremos evidencias numéricas de que esto es así para el caso particular con $A = -\Delta$. Estudios numéricos preliminares sugieren además que los resultados son aun mejores en algoritmos con $A = -\Delta + |x|^2$. Sin embargo en ningún caso existen resultados analíticos que señalen una u otra elección del gradiente como óptima.

10.3 Gradientes de Sobolev en espacios de Fourier discretos

En el resto del capítulo trabajaremos con funciones definidas sobre un volumen d -dimensional $\Omega \equiv \{x \in \Pi_i[a_i, b_i]\}$ con lados de longitud $L_i = b_i - a_i$. Las condiciones de contorno serán o bien periódicas o nulas¹. En ambos casos la base de funciones idóneas está formada por modos de Fourier con frecuencias espaciales múltiplos enteros de una dada

$$\psi_n(\mathbf{x}) = e^{ik_n \mathbf{x}}, \quad k_n = 2\pi \left(\frac{n_1}{L_1}, \dots, \frac{n_d}{L_d} \right), \quad n_i \in \mathbb{Z} \quad (10.23)$$

Es posible expandir cualquier función de módulo integrable, $f(x) \in L^1$, y que cumpla las condiciones de contorno empleando esta base de modos

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \hat{f}_n \phi_n(x). \quad (10.24)$$

Los coeficientes del desarrollo de Fourier se obtienen evaluando las integrales

$$\hat{f}_n = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \bar{\phi}_n(x) f(x), \quad (10.25)$$

¹ Las dos opciones son equivalentes para el tipo de problemas con el que trabajamos, en el que las soluciones son ondas solitarias localizadas que tienden a cero exponencialmente. Problemas más complicados requieren el uso de proyectores que seleccionen funciones con las condiciones de contorno apropiadas, no demasiado difíciles de implementar con las técnicas que mostramos.

donde $V = \prod_i L_i$ es el volumen del dominio Ω y surge por la falta de normalización en las funciones de la base, práctica habitual por el ahorro de tiempo de computación que supone.

La dificultad del desarrollo (10.24) estriba en que trabaja con un número infinito de grados de libertad. Para reducir la complejidad a costa de describir la función incógnita de forma aproximada, trabajaremos con los valores que resultan de muestrear esta función sobre una malla de puntos regularmente distribuidos en el intervalo Ω

$$\mathbf{x}_n = (n_1 h_1, \dots, n_d h_d), \quad n_i = 0, \dots, N_i - 1. \quad (10.26)$$

Las constante h_i representa el espaciado de la malla a lo largo de la dimensión i -ésima, n es un vector de enteros no negativos y denotamos los valores del muestreo mediante un índice abstracto: $f_n \equiv f(\mathbf{x}_n)$.

El procedimiento de muestreo convierte la base de Fourier (10.23) en redundante. Podemos quedarnos con un subconjunto de exponenciales para desarrollar cualquier función muestreada. La elección convencional viene dada por

$$\phi_n(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{x}}, \quad \mathbf{k}_n = 2\pi \left(\frac{n_1}{L_1}, \dots, \frac{n_d}{L_d} \right), \quad n_i = -M_i + 1, \dots, M_i \quad (10.27)$$

donde $M_i = [N_i/2]$ es el cociente entero resultante de dividir N_i en dos. Sobre esta base cualquier función muestreada se escribe como

$$f_m = \sum_n \hat{f}_n \phi_n(\mathbf{x}_m), \quad (10.28)$$

donde hacemos uso de los coeficientes definidos en la ecuación (10.25).

La ventajas de una base de Fourier discreta sobre otras técnicas radican en su precisión y su eficiencia. Respecto de la primera, la transformada de Fourier proporciona un aproximante a cualquier función en L^1 cuyo error es de orden $O(L_i/N_i)^p$ donde p es el máximo grado de diferenciabilidad de la función original, $f(\mathbf{x})$. Respecto de la eficiencia, existe un procedimiento numérico óptimo, conocido como la transformada de Fourier rápida, que permite evaluar los coeficientes de Fourier de una función muestreada y reconstruir un muestreo con un número de operaciones relativamente pequeño $O(\prod_i N_i \log N_i)$, si lo comparamos con las operaciones típicas de producto de matrices por vectores, $O(\prod_i N_i^2)$ y de inversión de matrices, $O(\prod_i N_i^3)$.

En nuestro caso la base de Fourier tiene el valor añadido de proporcionar una solución inmediata para el cálculo del gradiente de Sobolev. Para ello supongamos que hemos obtenido el gradiente ordinario de alguna forma y que su versión muestreada nos lleva al siguiente desarrollo

$$\nabla E(\mathbf{x}_n) = \sum_m \hat{e}_m \phi_m(\mathbf{x}_n). \quad (10.29)$$

El gradiente de Sobolev tendrá entonces una expansión similar

$$\nabla_s E(\mathbf{x}_n) = \sum_m \hat{s}_m \phi_m(\mathbf{x}_n). \quad (10.30)$$

donde la ecuación (10.17) nos proporciona los nuevos coeficientes de Fourier

$$\hat{s}_m = \frac{\hat{e}_m}{1 + k_m^2}. \quad (10.31)$$

En otras palabras, hemos encontrado un procedimiento sencillo de evaluación del gradiente de Sobolev, que resulta de preconditionar el gradiente de Lagrange, amortiguando más los modos de mayor frecuencia.

10.4 Aplicaciones en Mecánica Cuántica

10.4.1 El problema

En esta sección aplicaremos los gradientes de Sobolev a un problema de actualidad en el campo de la Física Cuántica. El sistema que estudiaremos es un gas diluido de átomos bosónicos enfriados hasta alcanzar el estado conocido como condensado de Bose–Einstein. Cuando la temperatura es lo suficientemente baja, el sistema en conjunto puede ser descrito por una misma función de onda compleja, $\psi(\mathbf{x}, t)$, regida por la ecuación de Gross–Pitaevskii (Ver el Capítulo 2).

El caso que nos interesa, por su interés práctico y su dificultad, es la condensación en trampas magnéticas rotantes (Capítulos 3 a 6). En esta variante las ecuaciones deben plantearse en el sistema de referencia que rota solidariamente con el confinamiento, obteniéndose la ecuación de Gross–Pitaevskii modificada

$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + g|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 - \Omega L_z \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (10.32)$$

Tras una adimensionalización apropiada (Sección §2.2.1), aparecen dos constantes, $g \in \mathbb{R}^+$ y $\Omega \in \mathbb{R}$, y un operador hermítico $L_z = i(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)$ cuyo valor esperado $\langle L_z \rangle = \int \bar{\psi} L_z \psi$, representa el *momento angular total* del condensado sobre el eje de rotación de la trampa.

Esta ecuación tiene una cantidad conservada asociada que recibe el nombre de *funcional de energía* del condensado

$$E(\psi) = \frac{1}{2} \int \left\{ |\nabla \psi|^2 + \bar{\psi} \left[V(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}g|\psi|^2 - \Omega L_z \right] \psi \right\} d^n x. \quad (10.33)$$

Nuestro objetivo en esta sección será *encontrar las soluciones o estados*, $\psi(\mathbf{x})$, *que son mínimos de la energía sujetos a una restricción sobre la norma*–2

$$\int |\psi|^2 \equiv N. \quad (10.34)$$

El valor particular de la norma viene dictado por el número de átomos del experimento, N , y es otra cantidad conservada por la ecuación (10.32). Es importante señalar además que en ausencia de esta restricción el mínimo absoluto de energía del funcional es siempre la solución trivial $\psi = 0$, carente de interés.

En Mecánica Estadística la formulación variacional del problema suele abandonarse en favor de la ecuación de Lagrange, que en este contexto recibe el nombre de ecuación de Ginzburg–Gross–Pitaevskii para los *estados estacionarios* (Ver §2.2.4). En este capítulo nosotros abandonaremos este camino, de reconocida dificultad, en favor de la búsqueda de soluciones iterativas para el problema variacional.

10.4.2 Evolución en tiempo imaginario

Podemos buscar los mínimos de (10.33) empleando técnicas de descenso modificadas para tener en cuenta la restricción de la norma (10.34). La forma más sencilla de proceder consiste en una modificación del descenso rápido continuo conocida como *evolución en tiempo imaginario*. Podemos resumir este método con el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\nu(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{\frac{N}{\|\sigma\|_{L^2}^2}} \sigma(\mathbf{x}, \tau), \quad (10.35)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \tau) = -\nabla E(\nu), \quad (10.36)$$

$$\nabla E(\nu) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + V(\mathbf{x}) + g|\nu|^2 - \Omega L_z \right] \nu. \quad (10.37)$$

Aquí vemos que $\nu(\mathbf{x}, \tau)$ evoluciona continuamente manteniendo una norma² constante e igual al parámetro N a la vez que desciende sobre la dirección marcada por el gradiente ordinario, ∇E . De hecho resulta fácil demostrar que la solución de estas ecuaciones sigue un camino de energía decreciente $\frac{\partial}{\partial \tau} [E(\nu(\mathbf{x}, \tau))] \leq 0$, y el límite dado por

$$\phi(\mathbf{x}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \nu(\mathbf{x}, \tau) \quad (10.38)$$

converge hacia algún punto crítico de la energía, que puede o puede no ser un mínimo².

En la práctica uno rara vez recurre al conjunto de ecuaciones continuo (10.36)–(10.35). En su lugar suele emplearse una técnica que consiste en integrar repetidamente la ecuación (10.36) por un intervalo de tiempo muy corto, Δt , aplicar la ecuación (10.35) con el valor de $\sigma(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ y utilizar la nueva estimación de $\nu(\mathbf{x}, t)$ para redefinir $\sigma \equiv \nu$. Este proceso se repite hasta que el gradiente alcanza una longitud lo bastante pequeña, hecho que tomamos como proximidad a un punto crítico. De esta forma se evita un problema esencial a la ecuación (10.36) que consiste en el crecimiento exponencial de la norma de la función auxiliar $\sigma(\mathbf{x}, t)$. Estas consideraciones son extensibles a los demás métodos que presentaremos a continuación.

² Resulta común a muchas técnicas de minimización global que la sucesión minimizante converja o quede “atrapada” en puntos críticos que ni siquiera son mínimos locales del funcional. Se necesita, por tanto, un análisis de estabilidad lineal para comprobar la validez de la solución.

Por último, aunque hemos presentado la evolución en tiempo imaginario en base al gradiente ordinario, nada nos impide emplear una dirección de descenso más apropiada, como pueda ser un gradiente de Sobolev. En este caso las ecuaciones son

$$\nu(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{\frac{N}{\|\sigma\|_{L^2}^2}} \sigma(\mathbf{x}, \tau), \quad (10.39)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \tau) = -\nabla_S E(\nu), \quad (10.40)$$

$$\nabla_S E(\nu) = (1 - \Delta)^{-1} \left[-\frac{1}{2} \Delta + V(\mathbf{x}) + g|\nu|^2 - \Omega L_z \right] \nu, \quad (10.41)$$

donde el punto crítico $\phi(\mathbf{x})$ viene dado nuevamente por el límite (10.38).

10.4.3 Minimización de la energía libre

Aunque la evolución en tiempo imaginario es fácil de entender y de implementar, el hecho de descender sobre una curva de funciones con una norma constante impone fuertes restricciones que dificultan la convergencia.

Una solución a este problema la proporcionan los *funcionales de energía libre*, donde el funcional a minimizar se asocia a una serie de multiplicadores de Lagrange que tienen en cuenta las restricciones existentes —en nuestro caso, la norma—, la sucesión minimizante se mueve sobre todo el espacio y son los multiplicadores los que aseguran la convergencia hacia una u otra norma.

La forma habitual de presentar estos funcionales en Física Estadística es mediante penalizadores aditivos lineales

$$F_{QM}(\psi) = E(\psi) - \mu N(\psi), \quad (10.42)$$

porque preservan el carácter lineal de las ecuaciones. Sin embargo, puesto que nuestras ecuaciones incluyen de serie términos no lineales, resulta más conveniente definir una energía libre no lineal que en su forma más sencilla es

$$F(\psi) = E(\psi) + \frac{1}{2} (N(\psi) - \lambda)^2. \quad (10.43)$$

En cualquiera de estas definiciones es sencillo demostrar que cualquier mínimo absoluto o relativo del funcional $F(\psi)$ ó $F_{QM}(\psi)$ es también un mínimo de la energía, $E(\psi)$, con a la restricción (10.34), y con un autovalor no-lineal dado por μ ó $\mu = N(\psi) - \lambda$, respectivamente. Además, como expondremos en el Apéndice 10.6, el funcional no-lineal posee de hecho al menos un mínimo con norma finita, algo que no podemos asegurar para el funcional de energía libre clásico, F_{QM} .

La ventaja práctica de los funcionales de energía libre consiste en que fijando un valor de los parámetros, $\{\lambda, \Omega, g\}$, podemos aplicar un descenso rápido continuo o discreto *sobre todo el dominio de definición* del funcional, sin necesidad de renormalizar la solución en cada paso. Al contrario de lo que podría parecer, un

mayor espacio de búsqueda facilita la convergencia, simplifica la implementación y nos evita considerar detalles técnicos como el tamaño óptimo de Δt , condiciones iniciales, etc

Así pues, en caso de escoger el método de descenso continuo podemos optar entre las ecuaciones ordinarias

$$\frac{\partial \nu}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \tau) = -\nabla F(\nu) = -\left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + g|\nu|^2 - \Omega L_z\right] \nu, \quad (10.44)$$

o las ecuaciones con el gradiente de Sobolev de la energía libre

$$\frac{\partial \nu}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \tau) = -\nabla_S F(\nu) = -(1 - \Delta)^{-1} \left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + g|\nu|^2 - \Omega L_z\right] \nu. \quad (10.45)$$

En ambos casos la solución final viene dada por el límite (10.38).

10.4.4 Resultados numéricos

En las secciones precedentes hemos enunciado cuatro métodos de minimización diferentes, dos de ellos con gradientes de Sobolev [Ecuaciones (10.40) y (10.45)] y dos sin preconditionado [Ecuaciones (10.36) y (10.44)]. En este apartado mostraremos los resultados de un estudio comparativo de la eficiencia de estos métodos en una serie de problemas modelo con aplicación práctica. Los detalles del estudio son los siguientes.

En primer lugar, los cuatro métodos han sido implementados utilizando la base de Fourier descrita en §10.3, con las simplificaciones que ello implica en el cálculo de derivadas y en la aplicación del preconditionado de Sobolev. Todas las simulaciones se han efectuado sobre problemas bidimensionales, con potencial radialmente simétrico, $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}|\mathbf{x}|^2$, y sobre una malla rectangular con 128×128 puntos equiespaciados. La experiencia práctica con problemas de mayor dificultad enseña que los resultados obtenidos son generalizables a otras dimensionalidades y a mallas más densas.

Debido a los requisitos de cada método, las dos variantes de la evolución en tiempo imaginario [Ecuaciones (10.36) y (10.40)] han sido integradas con un método de Runge-Kutta-Fehlberg de órdenes 4-5, donde la tolerancia y el paso de integración temporal se adaptan dinámicamente a medida que la solución se aproxima a un punto crítico. En segundo lugar, por motivaciones de rapidez y eficiencia la minimización de la energía libre se efectuó empleando un método de descenso rápido discreto en lugar de uno continuo [Ecuaciones (10.44) y (10.45)].

Todos los programas desarrollados se implementaron en el entorno de álgebra tensorial Yorick 1.4 [89], un entorno interpretado capaz de elaborados y muy eficientes cálculos numéricos y que puede ser equipado con la librería FFTW [40] para efectuar transformadas de Fourier rápidas. Los tiempos de ejecución que proporcionamos se obtuvieron en una estación de trabajo Digital Personal 500au,

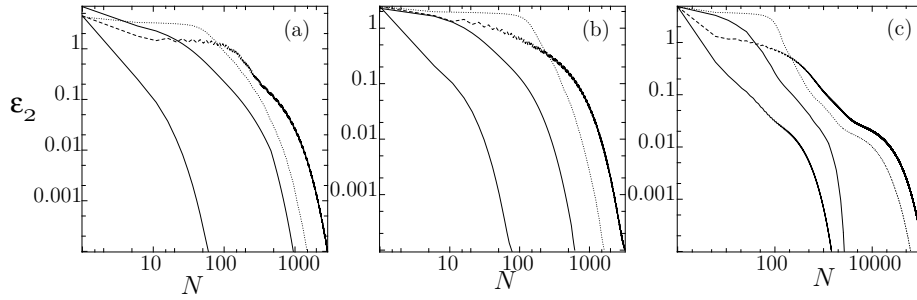


Fig. 10.1: Evolución del error, $\varepsilon_2 \equiv \|\psi - \psi_{exact}\|_2$, para la minimización de la energía libre con preconditionado de Sobolev (líneas sólidas inferior) y sin ella (línea discontinua), así como para la evolución en tiempo imaginario con gradientes de Sobolev (línea sólida superior) y con gradientes ordinarios (línea de puntos). Las gráficas (a), (b) y (c) corresponden a los problemas A, B y C respectivamente. Las gráficas se presentan en escala logarítmica.

pero los programas funcionan igualmente en ordenadores personales dotados de procesadores Pentium-II y menos de 64Mb de memoria.

Como problemas de prueba hemos considerado tres situaciones. El problema A es el más sencillo y corresponde a situaciones de trampa estacionaria, $\Omega = 0$, autointeracción intensa, $g = 100$, y dato inicial gaussiano de anchura unidad, $\psi_0 \propto e^{-|\mathbf{x}|^2}$, con una forma similar a la del estado fundamental.

Los problemas B y C involucran condensados rotantes, $\Omega = 0.6$, con interacción intensa, $g = 100$. En ambos casos tenemos un mínimo absoluto, proporcionado por la solución al problema A, y un mínimo local, formado por una solución con un vórtice centrado, que en las proximidades al cero se comporta como $\psi \propto (x_1 + ix_2)/|\mathbf{x}|^2$. La diferencia entre B y C radica en el dato inicial. El primer problema, B, parte de un perfil inicial gaussiano con un vórtice centrado, $\psi_0 \propto |\mathbf{x}|e^{-|\mathbf{x}|^2}(x_1 + ix_2)/|\mathbf{x}|^2$. En este caso todos los métodos quedan atrapados en el mínimo local con el vórtice centrado. El segundo problema, C, parte de un estado inicial sin simetría, formado por un perfil gaussiano y un vórtice desplazado, $\psi_0 \propto |\mathbf{x}|e^{-|\mathbf{x}|^2}((x_1 - y_1) + i(x_2 - y_1))/|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2$ que está próximo al mínimo local pero que pertenece a la cuenca de atracción del estado fundamental. Aquí todos los métodos requieren una cantidad de trabajo importante para discriminar el camino que lleva al mínimo absoluto y es aquí donde mejor se muestran las diferencias entre distintos métodos.

En la Tabla 10.1 resumimos los resultados de las simulaciones. En el caso A es evidente que el preconditionado de Sobolev tiene una influencia positiva sobre la convergencia, con un impresionante resultado de 55 pasos para el descenso rápido con energía libre. El problema B muestra una tendencia similar. Y por último en el caso C, el preconditionado de Sobolev mejora la convergencia dos órdenes de magnitud frente a los demás métodos. Así pues se confirman las expectativas planteadas en §10.2.4 de que una elección apropiada del espacio de minimización

Método		TI	TIS	EL	ELS
Caso A	Iteraciones	1320	945	2850	55
	Tiempo (s)	416	371	285	13
Caso B	Iteraciones	1630	615	3210	320
	Tiempo (s)	468	242	75	9
Caso C	Iteraciones	64195	2665	108505	1455
	Tiempo (s)	19863	1165	10861	168

Tab. 10.1: Número de iteraciones y tiempo de proceso para cada uno de los tres problemas considerados (A, B y C) y los métodos de minimización: tiempo imaginario con (TIS) y sin (TI) preconditionado de Sobolev, y energía libre con (ELS) y sin (EL) gradientes de Sobolev.

debe mejorar la convergencia.

10.5 Aplicaciones en Óptica no lineal

10.5.1 El modelo

En esta sección consideraremos un modelo matemático para un par de haces de luz coherente que interactúan entre sí incoherentemente (Capítulo 7). Describiremos la envolvente de cada haz con una función compleja de variable real, $u(\mathbf{x}, t)$ y $w(\mathbf{x}, t)$, que se propagan en un medio con una no linealidad saturable. Las ecuaciones del sistema en la aproximación paraxial son

$$i\partial_t u = -\Delta u + \frac{u}{1 + \kappa(|u|^2 + |w|^2)}, \quad (10.46)$$

$$i\partial_t w = -\Delta w + \frac{w}{1 + \kappa(|u|^2 + |w|^2)}. \quad (10.47)$$

Estas ecuaciones dan lugar a un problema de Cauchy, donde las funciones complejas $u, w : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{C}$, son funciones de cuadrado integrable sobre todo $\mathbb{R}$ y satisfacen el dato inicial $u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$ y $w(\mathbf{x}, 0) = w_0(\mathbf{x})$. Por último la constante $\kappa \in \mathbb{R}^+$ y el término no lineal $(1 + \kappa(|u|^2 + |w|^2))^{-1}$ describen la naturaleza del medio, y $-\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ es el operador laplaciano que da cuenta de la difracción de la luz.

Definiendo la función vectorial de dos componentes

$$\tilde{U}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{x}, t) \\ w(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}, \quad (10.48)$$

el funcional de energía adopta una forma extremadamente sencilla

$$E(\tilde{U}) = \int [-\tilde{U}^\dagger \Delta \tilde{U} + G(|\tilde{U}|^2)] d^n x, \quad (10.49)$$

donde $G(\rho) = \frac{1}{\kappa^2} (\ln(1 + \kappa\rho) - \kappa\rho)$ es la interacción saturable que describe nuestro medio. Los resultados de las secciones siguientes son aplicables a cualquier tipo de interacción no lineal dada por una función real de variable real, $G(\rho)$.

10.5.2 Soluciones estacionarias

Estamos interesados en soluciones estacionarias, que son de la forma

$$\tilde{U}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} e^{i\mu_u t} & 0 \\ 0 & e^{i\mu_w t} \end{pmatrix} U(\mathbf{x}) = e^{iMt} U(\mathbf{x}). \quad (10.50)$$

Estas funciones satisfacen ecuaciones elípticas

$$MU = -\Delta U + G'(|U|^2)U, \quad (10.51)$$

con condiciones de contorno Dirichlet en el infinito.

Al igual que en §10.4, nos encontramos ante un problema de autovalores no lineal para la triada $\{\mu_u, \mu_w, U\}$. Además, las soluciones estacionarias son de nuevo puntos críticos del funcional de energía sujeto a restricciones sobre la norma-2 de cada componente. En otras palabras, existen dos cantidades

$$N_u = \int |u|^2 d^n x, \quad (10.52)$$

$$N_w = \int |w|^2 d^n x, \quad (10.53)$$

que representan las intensidades totales de cada haz de luz por separado y la solución estacionaria es un punto crítico del funcional (10.49) sobre las superficies (10.52) y (10.53). Desde el punto de vista matemático, la variación a primer orden de la energía alrededor de una solución estacionaria, para N_u y N_w fijos, debe ser cero

$$\left. \frac{\delta E}{\delta U} \right|_{N_u, N_w} = 0, \quad (10.54)$$

ecuación equivalente a la original (10.51).

10.5.3 Estados fundamentales

En principio existen múltiples soluciones estacionarias de la ecuación (10.51). Sin embargo, si nos concentramos en la soluciones de mínima energía o *estados fundamentales*, podemos aplicar algunos de los métodos que mencionamos en §10.4 con ligeras modificaciones que tengan en cuenta la mayor dimensionalidad del problema

Por ejemplo es posible definir un funcional de energía libre no lineal

$$F(U) = E(U) + \frac{1}{2} (N_u - \lambda_u)^2 + \frac{1}{2} (N_w - \lambda_w)^2, \quad (10.55)$$

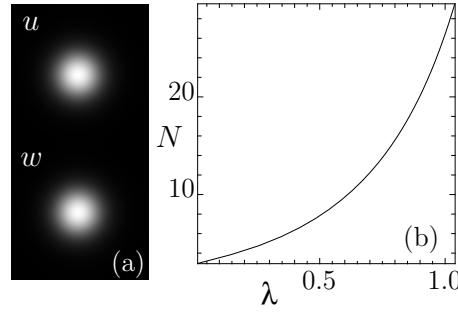


Fig. 10.2: (a) Perfil de densidad de un estado fundamental para $N_u = N_w = 30$. (b) Normas $N_u = N_w = N$ de las funciones frente al valor del multiplicador de Lagrange, $\lambda_u = \lambda_w = \lambda$.

y buscar sus mínimos utilizando el descenso rápido discreto con un preconditionado de Sobolev §10.4.3. Aplicando este procedimiento con distintos parámetros, $\{\lambda_u, \lambda_w\}$, obtenemos soluciones localizadas para u y w como las que se muestran en la Figura 10.2, donde los valores precisos de λ_u y λ_w determinan la norma o intensidad de cada componente.

Es importante señalar que, salvo un factor global, el estado fundamental del funcional (10.55) tiene la misma forma en las dos envolventes. Esto es

$$\begin{aligned} u_0(\mathbf{x}) &= N\sqrt{\xi}\rho(|\mathbf{x}|, N), \\ w_0(\mathbf{x}) &= N\sqrt{1-\xi}\rho(|\mathbf{x}|, N), \quad \forall \xi \in [0, 1]. \end{aligned} \quad (10.56)$$

La forma común ρ depende de la intensidad total $N = N_u + N_w$, y determina unívocamente los autovalores no lineales μ_u y μ_w . En consecuencia, si hubiéramos optado por una definición de energía libre clásica, como $F_{QM}(U) = E(U) + \mu_u N_u + \mu_w N_w$, habríamos topado con una degeneración infinita que impide la convergencia a los valores deseados $\{N_u, N_w\}$. Este problema desaparece al utilizar los multiplicadores de Lagrange no lineales y los nuevos parámetros $\{\lambda_u, \lambda_w\}$.

10.5.4 Estados excitados

En el campo de las guías de luz resultan de especial interés las propiedades de soluciones estacionarias (10.51) que no son estados fundamentales. Tales soluciones reciben el nombre de *estados excitados* y no responden a los métodos de minimización basados en el funcional de energía puesto que no son mínimos locales de éste.

En su lugar, la búsqueda de estados estacionarios necesita de principios variacionales basados en las ecuaciones (10.51). Para buscar uno de tales principios escribimos las ecuaciones estacionarias como la aplicación de un operador no lineal

$$f(U) \equiv [-\Delta - M + I(|U|^2)]U = 0. \quad (10.57)$$

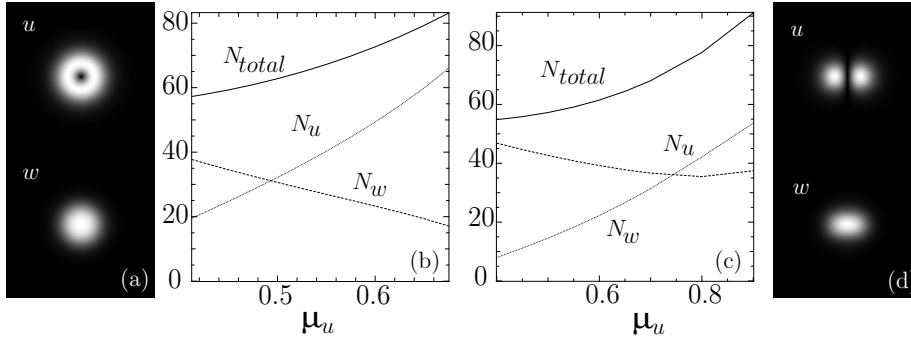


Fig. 10.3: (a) Solitones vectoriales con vorticidad y (b) sus intensidades N_u , N_w , $N_{total} = N_u + N_w$, como función del autovalor μ_u para $\mu_w = 1$ fijo. (d) Solitones vectoriales tipo dipolo y (c) sus intensidades N_u , N_w , $N_{total} = N_u + N_w$, como función del autovalor no lineal μ_u para $\mu_w = 1$ fijo.

Este operador mide el error de una solución cualquiera U al ser introducida en las ecuaciones estacionarias. Con el operador $f(U)$ podemos definir un funcional de error

$$F(U) \equiv \int f(U)^\dagger f(U) \geq 0 \quad (10.58)$$

de forma que el principio variacional sea “buscar U_0 tal que el funcional de error F alcanza un mínimo absoluto $F(U_0) = 0$.”

Con este principio variacional y el preconditionado de Sobolev el procedimiento para la búsqueda de estados estacionarios se reduce a resolver la ecuación

$$\frac{\partial \nu(\mathbf{x}, \tau)}{\partial \tau} = -\nabla_S F(\nu) = -(1 - \Delta)^{-1} \nabla F, \quad (10.59)$$

y buscar el límite de su solución a tiempo infinito,

$$U_0(\mathbf{x}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \nu(\mathbf{x}, \tau). \quad (10.60)$$

La interacción no lineal aparece en el cálculo del gradiente ordinario, ∇F ,

$$G \equiv (-\Delta + I(|U|^2))U, \quad (10.61)$$

$$\nabla F = (-\Delta + I(|U|^2))G + I'(|U|^2) (U^\dagger G + G^\dagger U) U, \quad (10.62)$$

en una pareja de fórmulas fácilmente computable mediante bases de Fourier. Este procedimiento es además generalizable a cualquier tipo de término no lineal, $G(\rho)$.

Existen múltiples ventajas en la aplicación de esta nueva técnica. La primera es que el funcional $F(U)$ no hace distinción entre estados fundamentales y estados excitados: cualquier solución estacionaria con los autovalores apropiados, $\mu_i = M_{ii}$, es un mínimo local del funcional de error y tiene la misma probabilidad de

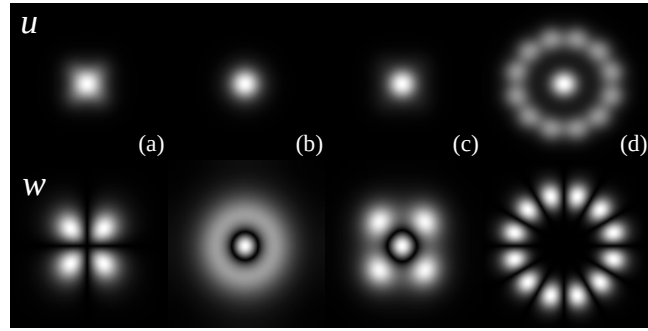


Fig. 10.4: Configuraciones multi-soliton inestables resultantes de la ecuación (10.59) con diferentes condiciones iniciales y similares parámetros $\mu_u = -1$, $\mu_w = -0.3$, $\kappa = 0.5$.

ser encontrado. Así pues, para distinguir entre las diversas soluciones, basta con modificar los parámetros $\{\mu_u, \mu_w\}$ y el dato inicial (Véase Figura 10.4).

La segunda ventaja igualmente importante es que no necesitamos incorporar multiplicadores de Lagrange para tener en cuenta la restricción de la norma, pues éstos se encuentran presentes en el operador M . Por último, esperamos que los mínimos del funcional de error formen un conjunto finito, discreto y separado, que nos eviten los problemas de los métodos de descenso que terminan atrapados en puntos críticos de $F(U)$ que no son mínimos. De hecho en este caso resulta fácil diseñar programas que reconozcan cuándo el algoritmo de descenso no converge hacia una solución estacionaria pues todas ellas deben satisfacer $F(U_0) = 0$.

Como ejemplos de aplicación de estas técnicas exponemos dos soluciones de particular importancia en las aplicaciones. La primera solución excitada recibe el nombre de *solitón vectorial tipo vórtice* (Sección §7.2.2) y sus características se resumen en las Figuras 10.3(a-b). Escogiendo un dato inicial apropiado podemos encontrar un segundo tipo de soluciones excitadas conocidas como *solitones vectoriales tipo dipolo* (Sección §7.2.4), que mostramos en las Figuras 10.3(c-d). Dependiendo de los parámetros $\mu_{u,w}$ podemos construir vórtices y dipolos con distintas intensidades en cada componente.

Es especialmente relevante que el funcional de error nos permita encontrar soluciones asimétricas. Tal es así que en la Figura 10.4 mostramos configuraciones multipolares *dinámicamente inestables* obtenidas sin más que variar el dato inicial. Ninguno de estos estados se podría obtener empleando técnicas convencionales, y en todos ellos se ha demostrado que el preconditionado de Sobolev es esencial para que el método converja.

10.5.5 Refinamiento de mallas y eficiencia

En este apartado queremos analizaremos la mejora de los métodos anteriores introduciendo técnicas de multimalla para acelerar la velocidad de convergencia. La idea de los métodos multimalla es emplear soluciones obtenidas en discretizaciones de grano grueso como estimaciones iniciales para un método iterativo que se realizará sobre otra malla más fina [14]. A grandes rasgos, el algoritmo consiste en partir de una malla gruesa, resolver la ecuación o principio variacional hasta una tolerancia no muy grande, interpolar el resultado sobre otra malla más fina y repetir el procedimiento hasta que la discretización espacial y el error de la solución alcancen los valores deseados.

Puesto que estamos trabajando con modos de Fourier sobre mallas regulares, la base de nuestro método multimalla será el método de interpolación de Fourier. La idea consiste en utilizar el desarrollo (10.28) *fuera de la malla original*, esto es

$$\psi^{(new)}(x) \equiv \sum_n c_n e^{ik_n x}, \quad \forall x \in \Omega. \quad (10.63)$$

Esta aproximación se vuelve a discretizar sobre otra malla más fina, resultando en una expansión de Fourier con un mayor número de modos que nos sirve de punto de partida para nuevas iteraciones

$$\psi_m^{(new)} = \sum_n c^{(new)} e^{ik_n^{(new)} x_m}, \quad (10.64)$$

A modo de prueba hemos aplicado esta técnica a la búsqueda de solitones vectoriales de tipo vórtice (Figura 10.3(a)) y de tipo dipolo (Figura 10.3(d)). Para ello hemos trabajado sobre mallas con 64×64 puntos utilizando probando como dato inicial un modo de Hermite apropiado y una solución obtenida sobre otra malla más gruesa, con 32×32 puntos. Como demuestran la evolución del error en la Figura 10.5 y los tiempos de cálculo de la Tabla 10.2, precalcular una solución aproximada sobre la malla gruesa tiene un coste mínimo y supone una mejora considerable en la convergencia.

10.6 Existencia de mínimos en el funcional de energía libre no lineal

En esta sección pretendemos demostrar la existencia de mínimos absolutos para el funcional de energía no lineal (10.43) definido en §10.4 para buscar de los estados fundamentales de un condensado de Bose–Einstein.

Para dotar de cierta generalidad a los resultados reescribiremos el funcional de energía libre en la forma siguiente

$$F(\psi) = \int \bar{\psi} A_{\Omega} \psi d^n x + \int \frac{g}{2} |\psi|^4 d^n x + \frac{1}{2} (N - \lambda)^2, \quad (10.65)$$

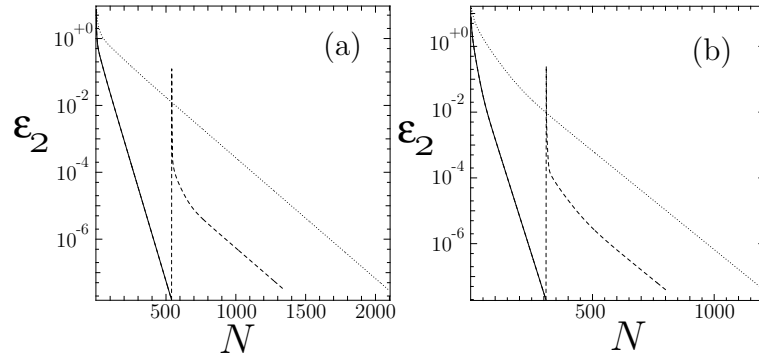


Fig. 10.5: Dependencia del error en norma-2 respecto del número de iteraciones en la búsqueda de (a) solitones vectoriales tipo vórtice y (b) solitones vectoriales tipo dipolo. Mostramos los resultados sobre una malla con 32×32 puntos (línea continua), 64×64 puntos con un dato inicial de Hermite (línea de puntos) y 64×64 puntos con un dato inicial interpolado a partir de la solución con 32×32 puntos (línea discontinua).

donde $N = \int |\psi|^2 d^n r$ es esencialmente la norma-2 de la función considerada y

$$A_\Omega = -\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) - \Omega L_z, \quad \Omega \in [0, 1) \quad (10.66)$$

es un operador hermítico definido positivo $A_\Omega \geq \mu_{min} > 0$.

Antes de proseguir necesitamos definir algunos espacios de funciones complejas de variable real en $\mathbb{R}^2$. La primera familia son los espacios L^p

$$L^p = \left\{ \psi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C} / \|\psi\|_p := \left(\int |\psi(\mathbf{x})|^p d^n x \right)^{1/p} < +\infty \right\}. \quad (10.67)$$

	Dato inicial					
	Modos de Hermite tipo vórtice		Solución interpolada vórtice	Modos de Hermite tipo dipolo		Solución interpolada dipolo
Malla	32×32	64×64	64×64	32×32	64×64	64×64
Iteraciones	540	2101	812	496	1206	496
Tiempo (s)	106	2006	757	60	1141	466

Tab. 10.2: Comparativa de la búsqueda de estados excitados [Ecuación (10.59)] con y sin refinamiento de malla. Mostramos los pasos y el tiempo empleados en función del tipo de dato inicial. Los datos iniciales “interpolados” corresponden a soluciones calculadas anteriormente sobre una malla con 32×32 puntos.

El segundo espacio necesario lo constituye el dominio de definición de A_Ω

$$H_\Omega = \left\{ \psi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C} / \|\psi\|_\Omega := \left(\int \bar{\psi}(\mathbf{x}) A_\Omega \psi(\mathbf{x}) \right)^{1/2} < +\infty \right\}. \quad (10.68)$$

En esta demostración resulta esencial la dimensionalidad del espacio sobre el que están definidas las funciones, $\mathbb{R}^2$, puesto que sobre este espacio $H_\Omega \subset L^4$. No obstante, creemos poder generalizar este resultado a otro número de dimensiones.

Con la notación anterior obtenemos el primer teorema importante:

Teorema 6. *El funcional de energía libre F dado por la ecuación (10.65) alcanza el mínimo absoluto al menos sobre una función que satisface las siguientes desigualdades*

$$0 < \|\psi\|_\Omega^2 \leq \lambda \|\psi\|_2^2 \leq \lambda(\lambda - \mu_{\min}).$$

Demostración. El primer paso de esta prueba consiste en demostrar que el dominio de definición del funcional coincide con todo el espacio H_Ω . Utilizando la positividad del operador A_Ω encontramos que la norma-2 de cualquier función se encuentra acotada superiormente por la aplicación del operador y el mínimo de sus autovalores, $\mu_{\min}$,

$$\|\psi\|_2 \leq \sqrt{\mu_{\min}} \|\psi\|_\Omega. \quad (10.69)$$

De aquí se deduce que $H_\Omega \subset L^2$.

A continuación, necesitamos la desigualdad de Sobolev [59]

$$\|\psi\|_k \leq \|\psi\|_2^{1-d} \|\nabla \psi\|_2^d \quad (10.70)$$

donde $d = n/2 - n/k$ y n es la dimensionalidad del espacio. Esta desigualdad, en nuestro caso se realiza con $n = 2$, $d = 1/2$ y por tanto conduce a una cota para la norma-4 de cualquier función de H_Ω

$$\|\psi\|_4 \leq \sqrt{\|\psi\|_2 \|\nabla \psi\|_2} \leq \mu_{\min}^{1/4} \|\psi\|_\Omega. \quad (10.71)$$

Hemos demostrado por tanto que $H_\Omega \subset L^4$. Puesto que $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_4$, $\|\cdot\|_\Omega < +\infty$ en H_Ω , concluimos que el funcional de energía libre F proporcionad definido en (10.65) está bien definido sobre todo el espacio H_Ω . En paso contrario, demostrar que H_Ω contiene todo el dominio de definición de F es más sencillo y surge de la positividad de los tres elementos que forman $F(\psi)$.

El funcional de energía libre F es además continuo. Para demostrarlo separamos este funcional como suma de tres funciones

$$F(\psi) = \|\psi\|_\Omega^2 + \frac{g}{2} \|\psi\|_4^4 + \frac{1}{2} (\|\psi\|_2^2 - \mu)^2. \quad (10.72)$$

Aplicando las cotas (10.69) y (10.71) es fácil demostrar que cada sumando es continuo y que por tanto

$$|F(\psi) - F(\xi)| \leq \delta(\epsilon), \quad \forall \xi : \|\psi - \xi\|_\Omega \leq \epsilon, \quad (10.73)$$

donde la constante $\delta(\varepsilon)$ está determinada por ε y $\|\psi\|_4$.

Utilizando la ecuación (10.72) es fácil demostrar la siguiente desigualdad

$$\frac{F(\psi)}{\|\psi\|_\Omega} \geq \|\psi\|_\Omega, \quad (10.74)$$

que implica la coercividad del funcional

$$\lim_{\|\psi\| \rightarrow \infty} \frac{F(\psi)}{\|\psi\|} \geq \alpha > 0. \quad (10.75)$$

Esta propiedad en esencia indica que el funcional crece más deprisa que la norma cuando esta tiende a infinito. La continuidad y la coercividad del funcional permiten aplicar el teorema 1 (§1.2) de la referencia [25], según el cual la existencia de al menos un minimizador $\{\inf F(u) : u \in X\}$ de F está garantizada si el funcional en cuestión es débilmente inferior semicontinuo (*weakly lower semicontinuous*) y coercivo $F : X \rightarrow \mathbb{R}$ sobre un espacio de Banach reflexivo, X .

Así pues sabemos que existe al menos un mínimo, pero desconocemos donde se encuentra. En lo que sigue demostraremos que el parámetro λ condiciona la ubicación del estado minimizante y estudiaremos dónde buscarlo. Para ello necesitamos definir una función unidimensional sobre una dirección arbitrario en el espacio de trabajo, $\psi \in H_\Omega$,

$$f(k) \equiv F(k\psi). \quad (10.76)$$

Esta función es un polinomio sobre la variable k ,

$$f(k) = kNa_\psi + k^2N^2\frac{u_\psi}{2} + \frac{1}{2}(kN - \lambda)^2, \quad (10.77)$$

donde $a_\psi = \int \bar{\psi} A \psi / N$ y $u_\psi = \frac{g}{2} \int |\psi|^4 / N^2$ son constantes que dependen únicamente de la dirección ψ .

Derivando este polinomio e imponiendo $k = 0$ encontramos que $f'(0) < 0$ en el origen para cualquier dirección posible, ψ . Esto significa que, como mencionamos en el enunciado del teorema, nuestro multiplicador de Lagrange λ nos permite evitar la solución trivial $\psi = 0$, la cual nunca puede ser un mínimo del funcional de energía libre.

Finalmente podemos restringir la ubicación del mínimo absoluto sobre una hipersuperficie en el espacio H_Ω . Derivando $f(k)$ encontramos que los puntos críticos satisfacen la ecuación

$$(a_\psi - \lambda) + Nk(u_\psi + 1) = 0. \quad (10.78)$$

Para cada dirección de búsqueda ψ , esta ecuación proporciona un único estado candidato a mínimo, $\phi = k\psi$, y el conjunto de todos estos estados forma una superficie sobre H_Ω . No es difícil demostrar que la norma de estos estados candidatos a mínimo está acotada por un valor que depende del multiplicador de Lagrange λ

$$\min N(\phi) = \max \left\{ 0, \frac{\lambda - a_\psi}{u_\psi + 1} \right\} \leq \lambda - \mu_{min}. \quad (10.79)$$

De la ecuación (10.78) también se deduce que para cualquier mínimo absoluto del funcional de energía libre, ψ_{min} , el valor esperado del operador A_Ω está acotado por la norma-2

$$\int \bar{\psi}_{min} A \psi_{min} = \|\psi_{min}\|_\Omega^2 \leq \lambda N(\psi_{min}). \quad (10.80)$$

De otro modo la solución trivial, $\psi = 0$, tendría menos energía que ψ_{min} . Así pues, en lugar de trabajar sobre una superficie desconocida, podemos confinar la ubicación de mínimo en un conjunto definido por dos desigualdades, (10.79) y (10.80)

$$W = \{\psi \in H_\Omega : 0 < N(\psi) \leq \lambda - \mu_{min}, \|\psi\|_\Omega^2 \leq \lambda N(\psi)\}. \quad (10.81)$$

□

Este teorema tiene importantes consecuencias prácticas. En primer lugar confirma que el funcional de energía $E(\psi)$ sujeto a la restricción de la norma tiene al menos un estado fundamental. En segundo lugar, pero igualmente importante, demuestra que nuestro penalizador de Lagrange $\frac{1}{2}(N - \mu)^2$ es especialmente bueno para esta clase de problemas no-lineales, puesto que evita soluciones espúreas con norma muy pequeña o demasiado grande. Y por último hemos obtenido cotas que nos restringen la ubicación del estado fundamental a un conjunto, $\bar{U}$, que, como demuestra el siguiente teorema, es un conjunto compacto.

Teorema 7. *Cualquier mínimo absoluto, ψ , del funcional de energía libre F definido por la ecuación (10.65) yace en el interior de un conjunto compacto de L^2*

$$\bar{U} = \{\psi \in L^2 : \|\psi\|_\Omega^2 \leq \lambda \|\psi\|_2^2 \leq \lambda(\lambda - 1)\}.$$

Demostración. Para el tipo de espacios sobre los que trabajamos, un conjunto es compacto sí y sólo sí es cerrado y podemos construir una ε -red para cualquier número positivo ε . Una ε -red del $\bar{U}$ es un conjunto finito $K_\varepsilon = \{\nu_1, \dots, \nu_k\}$ tal que para cualquier elemento ψ de $\bar{U}$ existe un elemento $\nu \in K_\varepsilon$ a una distancia pequeña $\|\psi - \nu\|_\Omega < \varepsilon$. Así pues la compacidad es equivalente a la posibilidad de construir aproximaciones arbitrariamente buenas de nuestro minimizador empleando una base lo suficientemente grande de funciones.

Es evidente que el conjunto $\bar{U}$ es cerrado en el subespacio H_Ω de L^2 . Sea $\{u_n\} \in \bar{U}$ una sucesión convergente y u su límite. Puesto que cada elemento de la sucesión cumple

$$\|u_n\|_\Omega \leq \sqrt{\lambda} \|u_n\|_2 < \lambda(\lambda - 1), \quad (10.82)$$

resulta obvio que

$$\|u\|_\Omega \leq \sqrt{\lambda} \|u\|_2 \leq \lambda(\lambda - 1), \quad (10.83)$$

y por tanto el conjunto $\bar{U}$ contiene todos sus puntos de acumulación.

La compacidad del conjunto $\bar{U}$ esencialmente surge de que los autoestados del operador hermítico y definido positivo A_Ω forman una base completa de H_Ω , a la vez que los autovalores del operador A_Ω forman una sucesión monótonamente creciente de números positivos. Recordamos brevemente que estos autoestados son de la forma

$$\phi_{n,l} = P_n^l(|\mathbf{x}|) \frac{x_1 + ix_2}{|\mathbf{x}|^2} e^{-|\mathbf{x}|^2/2}, \quad (10.84)$$

donde P_n^l es un polinomio generalizado de Laguerre y el autovalor asociado vale

$$A_\Omega \phi_{n,l} = \mu_{n,l} \phi_{n,l} = (2n + (1 - \Omega)l + 1) \phi_{n,l}, \quad n, l \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (10.85)$$

Escojamos cualquier número natural k tal que $k + 1 > \lambda$. Podemos separar el espacio H_Ω como suma directa $H_\Omega = H_0^{k+1} \oplus H_{k+1}^\infty$ donde

$$H_j^k = \text{lin}\{\phi_{n,l} : j \leq 2n + l < k\}. \quad (10.86)$$

El punto importante es que H_0^{k+1} es isomorfo a $\mathbb{R}^m$ para algún número natural m . Por tanto la intersección $\bar{U}_k = \bar{U} \cap H_0^{k+1}$ se encuentra en una esfera compacta m -dimensional de radio $\sqrt{\lambda - 1}$, para la cual podemos construir una ε -ret que también será ε -ret de $\bar{U}_k$. Separando cualquier elemento del conjunto cerrado $\bar{U}$

$$\psi = \psi_a + \psi_b, \quad \psi_a \in \bar{U}_k, \psi_b \in H_{k+1}^\infty, \quad (10.87)$$

y utilizando la definición de $\bar{U}_k$ demostramos que la proyección de ψ fuera de $\bar{U}_k$ es tan pequeña como deseemos

$$\|\psi_b\|_2^2 \leq \frac{\lambda}{k+1} N, \quad (10.88)$$

de manera que para cualquier $k > \lambda N / \varepsilon$, una ε -red de $\bar{U}_k$ es también una ε -red de $\bar{U}$, lo que prueba su compacidad.

Por último, una inspección de los autovalores A_Ω unida a las desigualdades (10.79-10.80) demuestra que el mínimo absoluto de F pertenece al compacto $\bar{U}$. $\square$

10.7 Conclusiones

En este capítulo hemos desarrollado un procedimiento eficiente para mejorar la convergencia de diferentes métodos de minimización. Esta técnica se basa en los llamados gradientes de Sobolev y en esencia consiste en un preconditionamiento respecto de las definiciones de gradiente habituales en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Planteando los problemas de minimización por medio de métodos espectrales basados en modos de Fourier, el preconditionamiento de Sobolev se traduce en un paso trivial a añadir al cálculo de las direcciones de descenso en métodos existentes.

A modo de ejemplo hemos incorporado este preconditionamiento en dos algoritmos conocidos como *evolución en tiempo imaginario* (§10.4.2) y *minimización de la energía libre* (§10.4.3), comparando la eficiencia de los programas resultantes en problemas realistas de Mecánica Cuántica.

Por último hemos desarrollado una técnica para buscar soluciones no fundamentales de ecuaciones de Schrödinger acopladas. Este método introduce un nuevo principio variacional basado en el operador no-lineal correspondiente a las ecuaciones. Una vez demostrada la viabilidad del método, hemos estudiado cómo mejorar la convergencia utilizando gradientes de Sobolev junto con técnicas multimallas construidas en base a interpolación de Fourier.

Todas estas técnicas son susceptibles de ampliación mediante el empleo de espacios de funciones más apropiados y el uso de mejores preconditionadores, procedimiento que hemos esquematizado en la sección §10.2.4.

Parte IV

CONCLUSIONES

11. CONCLUSIONES Y VÍAS DE AMPLIACIÓN

Son muchos y muy diversos los resultados presentados a lo largo de esta tesis. A continuación se resumen, clasificados por temas, las conclusiones más importantes de cada apartado junto con algunas cuestiones que permanecen abiertas y que esperamos desarrollar en un futuro próximo.

Vórtices en condensados de Bose–Einstein

Hemos estudiado las soluciones estacionarias de la ecuación de Gross–Pitaevskii, demostrando la posibilidad de crear corrientes circulares estables en el condensado (Capítulo 3), y comprobando el acuerdo entre las predicciones de la teoría de campo medio y los resultados experimentales.

Destacamos en primer lugar las predicciones del Capítulo 5 sobre la estabilidad de los experimentos del JILA [87] y el descubrimiento del fenómeno de transferencia de vorticidad entre las dos especies de condensado.

En segundo lugar situamos los fenómenos asociados a condensados elongados y que incluyen la histéresis en la nucleación del primer vórtice (Sección 4.3) y el doblado de los vórtices incluso en configuraciones con simetría axial (Sección 4.4). Éste último resultado es de particular importancia por presentar un nuevo tipo de ruptura de simetría que incluye la elección del sentido de giro del vórtice y el doblado en una particular dirección.

Quedan muchos problemas por resolver en este campo. Las más relevantes a corto plazo son, quizás, los siguientes:

- Tanto en condensados bidimensionales como en los tridimensionales, la velocidad de rotación no puede exceder un cierto valor crítico, $\Omega = \omega_{\perp}$, porque por encima de este valor el funcional de energía carece de estado fundamental. En este sentido la región $\Omega_{turb} < \Omega \leq \omega_{\perp}$ (Sección §3.1.4) permanece sin explorar, y se desconoce tanto experimental como teóricamente el comportamiento del condensado a altas velocidades de rotación.
- El fenómeno del doblado de los vórtices deja aún cuestiones pendientes, que incluyen la búsqueda de una demostración analítica rigurosa que confirme los resultados numéricos y que permita establecer una relación inequívoca entre la intensidad de los fenómenos no lineales, la forma de la trampa y la magnitud del doblado.

Hidrodinámica de condensados

Utilizando la formulación hidrodinámica de la teoría de campo medio, y suposiciones razonables sobre el tipo de flujo que alberga el condensado, hemos sido capaces de obtener estimaciones precisas del momento angular y el momento de inercia de un condensado asimétrico sometido a rotación (Capítulo 6). Algunas de estas predicciones, incluyendo la existencia de soluciones supercríticas, se han visto confirmadas recientemente en experimentos de la ENS [80]. Como vía de ampliación destacamos un problema muy concreto:

- En el estudio del vórtice centrado consideramos que el perfil de densidad corresponde a órbitas elípticas concéntricas (¡No confocales!). Numéricamente se comprueba que esta aproximación falla en la proximidad al centro de la nube, donde se encuentra el vórtice. Sería interesante estudiar con detalle la forma del vórtice y el tipo de flujo que implica, lo cual esencialmente consiste en resolver la ecuación de Poisson con condiciones de contorno físicamente razonables.

Solitones dipolares en medios saturables

Hemos estudiado la posibilidad de crear estados ligados estables y asimétricos a partir de dos haces coherentes que interactúan entre sí por medio de un material con un índice de refracción no lineal saturable (Capítulo 7). Estos estados han sido bautizados con el nombre de *solitones vectoriales de tipo dipolo* o simplemente *dipolos*. Mediante un análisis lineal y reproduciendo numéricamente las colisiones de solitones y dipolos contra un dipolo hemos demostrado la robustez de estos objetos, encontrándonos con una variedad de fenómenos que convierten el dipolo en un objeto versátil desde el punto de vista experimental.

- Los métodos analítico-numéricos que nos permitieron encontrar el dipolo apuntan a la existencia de estados vectoriales de complejidad superior: anillos de solitones, estrellas, cuadrupolos y octupolos, etc (Ver figura 10.4). Sería interesante explorar este espacio de soluciones y finalmente concluir si es posible encontrar otros estados estables de utilidad.

Descripción finito-dimensional de ecuaciones de Schrödinger no lineales

En el Capítulo 8 aplicamos el método de momentos a la ecuación de Schrödinger no lineal con potencial cuadrático. Aplicando unas sencillas reglas, obtenemos ecuaciones diferenciales ordinarias que relacionan un conjunto escogido de observables físicos definidos como valores esperados de un paquete de ondas. En un conjunto de problemas de gran importancia las ecuaciones que resultan son cerradas. En el resto de ocasiones es posible desarrollar un tipo de aproximaciones que denominamos aproximación de momentos independientes (Ver §8.4.2), técnica que nos permite cerrar las ecuaciones y obtener soluciones numéricas de las mismas.

Estabilidad bajo perturbaciones periódicas

En el Capítulo 9 estudiamos la evolución de un paquete de ondas en la ecuación de Schrödinger no lineal con potencial parabólico y perturbación paramétrica. En problemas con simetría radial demostramos rigurosamente la existencia de resonancias extensas en las que participa la solución en todos los puntos del espacio y que dan lugar a oscilaciones no acotadas de las anchuras y el centro del paquete de ondas. En problemas con mayor dimensionalidad mostramos suficientes evidencias

numéricas de la existencia de estas resonancias. El fenómeno de las resonancias extensas es nuevo en el campo de las ondas no-lineales y tiene como posibles aplicaciones la focalización de haces láser en guías de onda parabólicas [101] y la excitación de modos colectivos en un condensado de Bose–Einstein.

- Queda como cuestión pendiente demostrar la existencia de resonancias la ecuación de Schrödinger no lineal en sistemas de una a tres dimensiones con y sin simetría. Tampoco existen resultados analíticos sobre la existencia de resonancias en las ecuaciones de momentos bajo la aproximación de momentos independientes en dimensiones y geometrías arbitrarias.

Energía libre y gradientes de Sobolev

Hemos desarrollado un procedimiento eficiente y general que mejora la convergencia de los métodos de minimización sobre espacios de funciones. Esta técnica consiste en precondicionamiento de las direcciones de descenso en espacio de Fourier y ha sido aplicada con éxito en el estudio de condensados de Bose–Einstein y en Óptica no lineal.

En campo de la condensación de Bose hemos encontramos una definición más adecuada de la energía libre, que nos permite demostrar la existencia de estados fundamentales para el condensado con interacción repulsiva en trampas armónicas. Este funcional resulta además particularmente útil en la búsqueda de estados fundamentales con normas concretas.

Por último, hemos desarrollado una técnica nueva para la búsqueda de estados excitados en ecuaciones de Schrödinger no lineales acopladas, método esencial en la búsqueda de soluciones como son los dipolos del Capítulo 7.

- Uno de los problemas abiertos consiste en la búsqueda de mejores preconditionadores que el utilizado en el cálculo de los gradientes de Sobolev. Como se apuntó en §10.2.4, la elección de un producto escalar que aproxime mejor la parte lineal del funcional minimizado puede dar lugar a una convergencia aún más rápida. Esta idea se ha visto confirmada en estudios numéricos preliminares, si bien la técnica para la evaluación de preconditionadores necesita ser optimizada.
- Igual que la energía libre no lineal (10.43) resulta útil para demostrar la existencia de estados fundamentales en el condensado gaseoso con interacción repulsiva, sería interesante explorar posibles aplicaciones de este funcional en otros campos de la Física.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] S. Abe and A. Ogura, *Solitary waves and their critical behavior in a nonlinear nonlocal medium with power-law response*, Phys. Rev. E, (1998).
- [2] A. B. Aceves et al., Opt. Comm., 105 (1994), p. 341.
- [3] J. F. Allen and A. D. Misener, Nature, 141 (1938), p. 75.
- [4] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Vortex precession in Bose-Einstein condensates: Observations with filled and empty cores*, Phys. Rev. Lett., 85 (2000), pp. 2857–2860.
- [5] D. Anderson, *Variational approach to nonlinear pulse propagation in optical fibers*, Phys. Rev. A, 27 (1983), pp. 3135–3145.
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, Science, 269.
- [7] M. R. Andrews, D. M. Kurn, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, C. G. Townsend, S. Inouye, and W. Ketterle, *Propagation of sound in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett., 79 (1997).
- [8] A. Ankiewicz, Opt. Comm., 103 (1993), p. 410.
- [9] F. M. Arscott, *Periodic Differential Equations*, Pergamon Press, Oxford, 1964.
- [10] N. Bogoliubov, *On the theory of superfluidity*, J. Phys., 11 (1947), p. 23.
- [11] N. Bogoliubov and V. A. Mitropolsky, *Asymptotic Methods in the Theory of Nonlinear Oscillations*, Hindustan Publishing Corp., New Delhi, 1961.
- [12] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, *Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions*, Phys. Rev. Lett., 75.
- [13] A. D. Brandau and H. Shen, J. Phys. A, 27 (1994), pp. 7147+.
- [14] W. L. Briggs, V. E. Henson, and S. F. McCormick, *A multigrid tutorial*, SIAM, 2000.

-
- [15] A. V. Buryak, Y. S. Kivshar, M. Shih, and M. Segev, *Induced coherence and stable soliton spiraling*, Phys. Rev. Lett., 82 (1999), p. 81.
- [16] D. A. Butts and D. S. Rokhsar, *Predicted signatures of rotating Bose-Einstein condensates*, Nature, 397.
- [17] E. Caglioti et al., J. Opt. Soc. Am. B., 7 (1990), p. 374.
- [18] B. M. Caradoc-Davies, R. J. Ballagh, and K. Burnett, *Coherent dynamics of vortex formation in trapped Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett., 83.
- [19] Y. Castin and R. Dum, *Instability and depletion of an excited Bose-Einstein condensate in a trap*, Phys. Rev. Lett., 79.
- [20] ———, *Low-temperature Bose-Einstein condensates in time-dependent traps: Beyond the $u(1)$ symmetry-breaking approach*, Phys. Rev. A, 57.
- [21] F. Chevy. comunicación privada.
- [22] F. Chevy, K. W. Madison, and J. Dalibard, *Measurement of the angular momentum of a rotating Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett., 85 (2000).
- [23] D.Ñ. Christodoulides and R. J. Joseph, *Vector solitons in birefringent non-linear dispersive media*, Opt. Lett., 13 (1998), pp. 53–55.
- [24] E. Cornell. comunicación privada.
- [25] B. Dacorogna, *Direct Methods in the Calculus of Variations*, Springer-Verlag, 1989.
- [26] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys., 71.
- [27] F. Dalfovo and M. Modugno, *Free expansion of Bose-Einstein condensates with quantized vortices*, Phys. Rev. A, 61.
- [28] F. Dalfovo and S. Stringari, *Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices*, Phys. Rev. A, 53.
- [29] ———, *Shape deformations and angular-momentum transfer in trapped Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A, 63 (2001), p. 011601.
- [30] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, Phys. Rev. Lett., 75.
- [31] M. Desaix, D. Anderson, and M. Lisak, Opt. Lett., 15 (1990), p. 18.

-
- [32] R. J. Dodd, K. Burnett, M. Edwards, and C. W. Clark, *Excitation spectroscopy of vortex states in dilute Bose-Einstein condensed gases*, Phys. Rev. A, (1997).
- [33] R. Dum, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Creation of dark solitons and vortices in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett., 80.
- [34] M. Edwards, R. J. Dodd, C. W. Clark, and K. Burnett, *Zero-temperature, mean-field theory of atomic Bose-Einstein condensates*, J. Res. Natl. Inst. Stand. Tech., 101.
- [35] D. L. Feder, A. A. Svidzinsky, A. L. Fetter, and C. W. Clark, *Anomalous modes drive vortex dynamics in confined bose-einstein condensates*, cond-mat/0009086, (2000).
- [36] Z. Fei, V. M. Pérez-García, and L. Vázquez, Appl. Math. Comput., 71 (1995), p. 165.
- [37] H. Feshbach, *A unified theory of nuclear reactions. II*, Ann. Phys., 19 (1962), p. 287.
- [38] R. P. Feynmann, R. B. Leighton, and M. Sands, *Física. Vol. II. Electromagnetismo y materia.*, Addison-Wesley Iberoamericana, 1987, ch. 40.
- [39] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak, *Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen*, Phys. Rev. Lett., 81.
- [40] M. Frigo and S. G. Johnson, *Fftw: An adaptive software architecture for the fft*, in Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, IEEE, Seattle, WA, 1998, pp. 1381–1384.
- [41] J. J. García-Ripoll, J. I. Cirac, J. Anglin, V. M. Pérez-García, and P. Zoller, *Spin monopoles with Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A, 61 (2000), p. 053609.
- [42] J. J. García-Ripoll, V. V. Konotop, B. Malomed, and V. M. Pérez-García, *Quasilocal Gross-Pitaevskii equation for bose-einstein condensates with self-attraction*, Phys. Rev. E, [submitted, EV7165] (2001).
- [43] J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García, *Barrier resonances in Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. A, 59 (1999), pp. 2220–2231.
- [44] ———, *Stability of vortices in inhomogeneous Bose condensates subject to rotation: A three-dimensional analysis*, Phys. Rev. A, 60 (1999), pp. 4864–4874.
- [45] ———, *Anomalous rotational properties of Bose-Einstein condensates in asymmetric traps*, Phys. Rev. A, [submitted, LQ7748A] (2000).

-
- [46] ———, *Optimizing nonlinear Schrödinger functionals with Sobolev gradients: Applications to Quantum Mechanics and Nonlinear Optics*, SIAM Jour. Sci. Comput., [submitted] (2000).
 - [47] ———, *Stable and unstable vortices in multicomponent Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett., 84 (2000), p. 4264.
 - [48] ———, *Vortex bending and tightly packed vortex lattices in Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A, [submitted, LQ8427] (2001).
 - [49] ———, *Vortex nucleation and hysteresis phenomena in rotating Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A, (to be published) (2001).
 - [50] J. J. García-Ripoll, V. M. Pérez-García, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, *Dipole-mode vector solitons*, Phys. Rev. Lett, 85 (2000), pp. 82–85.
 - [51] J. J. García-Ripoll, V. M. Pérez-García, and P. Torres, *Extended parametric resonances in nonlinear Schrödinger systems*, Phys. Rev. Lett., 30 (1999), pp. 1715–1718.
 - [52] E. V. Goldstein, E. M. Wright, and P. Meystre, *Detection of condensate vortex states*, Phys. Rev. A, 58.
 - [53] A. Griffin, *A brief history of our understanding of BEC: from Bose to Blieaev*, e-print cond-mat/9901123, 1999.
 - [54] E. P. Gross, *Hydrodynamics of a superfluid condensate*, J. Math. Phys., 4 (1963), pp. 195–207.
 - [55] E. Hairer, S. Nördsett, and G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations*, vol. I and II, Springer-Verlag, 1992.
 - [56] P. C. Haljan, B. Anderson, I. Coddington, and E. Cornell, *Using surface-wave spectroscopy to characterize tilt modes of a vortex in a bose-einstein condensate*, cond-mat/0012320, (2000).
 - [57] D. S. Hall, M. R. Matthews, J. R. Ensher, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Dynamics of component separation in a binary mixture of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett., 81.
 - [58] E. Hodby, G. Hechenblaikner, O. Marago, J. Arlt, S. Hopkins, and C. J. Foot, *Bose-einstein condensation in a stiff top trap with adjustable geometry*, cond-mat/0004015, (2000).
 - [59] L. Hörmander, *The analysis of linear partial differential operators*, vol. I, Springer, 1983.
 - [60] M. Hoyuelos, P. Colet, M. San Miguel, and D. Walgraef, *Polarization patterns in Kerr media*, Phys. Rev. E, 58 (1998), pp. 2992–3007.

-
- [61] M. Hoyuelos et al., *Com. Phys. Commun.*, 121 (1999), p. 414.
- [62] T. Isoshima and K. Machida, *Bose-Einstein condensation in a confined geometry with and without a vortex*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 66.
- [63] ———, *Excitation spectrum in a cylindrical Bose-Einstein condensate*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 67.
- [64] ———, *Instability of the nonvortex state toward a quantized vortex in a Bose-Einstein condensate under external rotation*, *Phys. Rev. A*, 60.
- [65] ———, *Vortex stabilization in Bose-Einstein condensate of alkali-metal atom gas*, *Phys. Rev. A*, 59.
- [66] M. J. H. J. E. Williams, *Preparing topological states of a Bose-Einstein condensate*, *Nature*, 401 (1999), pp. 568–572.
- [67] D. S. Jin, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Collective excitations of a Bose-Einstein condensate in a dilute gas*, *Phys. Rev. Lett.*, 77.
- [68] D. W. Jordan and P. Smith, *Nonlinear Ordinary Differential Equations*, Applied Mathematics and Computing Science, Oxford, 187.
- [69] P. Kapitza, *Nature*, (1938), p. 74.
- [70] M. Karlsson et al., *Opt. Lett.*, 18 (1991), p. 1373.
- [71] Y. S. Kivshar and B. Luther-Davis, *Phys. Rep.*, 81 (1998).
- [72] Y. S. Kivshar and B. A. Malomed, *Dynamics of solitons in nearly integrable systems*, *Rev. Mod. Phys.*, 61 (1989), pp. 763–915.
- [73] Y. S. Kivshar and M. L. Quiroga-Teixeiro, *Opt. Lett.*, 22 (1993), p. 1.
- [74] S. J. J. M. F. Kokkelmans, B. J. Verhaar, and K. Gibble, *Prospects for Bose-Einstein condensation in cesium*, *Phys. Rev. Lett.*, 81.
- [75] V. V. Konotop and L. Vázquez, *Nonlinear Random Waves*, World Scientific, London, 1994.
- [76] W. Krolkowski, B. Luther-Davis, G. McCarthy, M. Geisser, Y. S. Kivshar, E. Ostrovskaya, C. Weilnau, C. Denz, J. J. García-Ripoll, and V. M. Pérez-García, *Molecules of light: dipole-mode vector solitons*, *Photonic News*, (2000).
- [77] L. D. Landau, *J. Phys. U.S.S.R.*, 5 (1941), p. 71.
- [78] V. D. Larichev and G. M. Reznik, *Sov. Phys. Dokl.*, 21 (1976), p. 581.
- [79] F. London, *Nature*, 141 (1938), p. 643.

-
- [80] K. W. Madison, F. Chevy, V. Bretin, and J. Dalibard, *Stationary states of a rotating bose-einstein condensate: routes to vortex nucleation*, e-print cond-mat/0101051, (2000).
 - [81] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben, and J. Dalibard, *Vortex formation in a stirred Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett., 84.
 - [82] W. Magnus and S. Winkler, *Hill's equation*, Dover Publications, New York, 1966.
 - [83] J. H. Malmberg, A. H. Carlsson, D. Anderson, M. Lisak, E. A. Ostrovskaya, and Y. S. Kivshar, *Vector solitons in (2+1) dimension*, e-print patt-sol/9912001, (1999).
 - [84] A. V. Mamaev, A. A. Zozulya, V. K. Mezentsev, D. Z. Anderson, and M. Saffman, *Bound dipole solitary solutions in anisotropic nonlocal self-focusing media*, Phys. Rev. A, 56 (1997), p. R1110.
 - [85] O. M. Maragó, S. A. Hopkins, J. Arlt, E. Hodby, G. Heckenblaikner, and C. J. Foot, *Observation of the scissors mode and evidence for superfluidity of a trapped Bose-Einstein condensed gas*, Phys. Rev. Lett., 84.
 - [86] K.-P. Marzlin, W. Zhang, and E. M. Wright, *Vortex coupler for atomic Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. Lett., 79.
 - [87] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, *Vortices in a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett., 83 (1999), p. 2498.
 - [88] V. A. Mironov et al., *Multidimensional bound solitons in nonlinear field equations*, Sov. Phys. Dokl., 26 (1981), pp. 861–862.
 - [89] D. H. Munro.
 - [90] Z. H. Musslimani, M. Segev, D. N. Christodoulides, and M. Soljacić, *Composite multihump vector solitons carrying topological charge*, Phys. Rev. Lett., (2000).
 - [91] J. W. Neuberger, *Sobolev Gradients and differential equations*, Springer-Verlag, 1997.
 - [92] J. W. Neuberger and R. J. Renka, *Sobolev gradients and the Ginzburg-Landau equation*, SIAM. J. Sci. Comput., 20 (1998), pp. 582–590.
 - [93] E. A. Ostrovskaya, Y. S. Kivshar, D. V. Skryabin, and W. Firth, *Stability of multihump optical solitons*, Phys. Rev. Lett., 83 (1999), p. 296.
 - [94] P. Pascual and L. Vázquez, *Sine-Gordon solitons under weak stochastic perturbations*, Phys. Rev. B, 32 (1985), pp. 8305–8311.

-
- [95] P. J. Pascual and L. Vazquez, *Hadronic J.*, 9 (1984), p. 397.
- [96] V. M. Pérez-García and J. J. García-Ripoll, *Two-mode theory of vortex stability in multicomponent bose-einstein condensates*, *Phys. Rev. A*, 62 (2000), p. 033601.
- [97] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Dynamics of Bose-Einstein condensates: Variational solutions of the Gross-Pitaevskii equations*, *Phys. Rev. A*, 56.
- [98] V. M. Pérez-García, H. Michinel, J. I. Cirac, M. Lewenstein, and P. Zoller, *Low energy excitations of a Bose-Einstein condensate: A time-dependent variational analysis*, *Phys. Rev. Lett.*, 77.
- [99] V. M. Pérez-García, H. Michinel, and H. Herrero, *Bose-Einstein solitons in highly asymmetric traps*, *Phys. Rev. A*, 57.
- [100] V. M. Pérez-García, M. A. Porras, and L. Vázquez, *The nonlinear Schrödinger equation with dissipation and the moment method*, *Phys. Lett. A*, 202 (1995), pp. 176–182.
- [101] V. M. Pérez-García, P. Torres, J. J. García-Ripoll, and H. Michinel, *Moment analysis of paraxial propagation in a nonlinear graded index fiber*, *Quant. Semiclas. Optics*, 69 (2000), p. 69.
- [102] V. I. Petviashvili and O. A. Pokhotelov, *JETP Lett.*, 42 (1985), p. 54.
- [103] E. Pinney, *Proc. Am. Math. Soc.*, 1 (1950), p. 681.
- [104] L. P. Pitaevskii, *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, *Sov. Phys. JETP*, 13.
- [105] M. A. Porras, J. Alda, and E. Bernabeu, *Nonlinear propagation and transformation of arbitrary laser beams by means of the generalized abcd formalism*, *Appl. Opt.*, 32 (1993), pp. 5885–5892.
- [106] C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle, *Evidence for a critical velocity in a Bose-Einstein condensed gas*, *Phys. Rev. Lett.*, 83 (1999), p. 2502.
- [107] A. Recati, F. Zambelli, and S. Stringari, *Overcritical rotation of a trapped Bose-Einstein condensate*, *Phys. Rev. Lett.*, 86 (2001), p. 377.
- [108] D. S. Rokhsar, *Vortex stability and persistent currents in trapped Bose gases*, *Phys. Rev. Lett.*, 79.
- [109] M. San Miguel et al., *Phase instabilities in the laser vector complex Ginzburg-Landau equation*, *Phys. Rev. Lett.*, 75 (1995), pp. 425–428.
- [110] A. Sánchez and A. R. Bishop, *SIAM Rev.*, 40 (1998), p. 579.

-
- [111] J. Sanmartín, *O Botafumeiro: Parametric pumping in the Middle Ages*, Am. Jour. Phys., 52 (1984), pp. 937–945.
- [112] M. Segev and G. I. Stegeman, *Self trapping of optical beams: spatial solitons*, Phys. Today, 51 (1998), pp. 42–48.
- [113] L. F. Shampine and M. W. Reichelt, SIAM J. Sci. Comput., 18 (1997), p. 1.
- [114] Q. Sheng, I. M. A. Jour. of Numer. Anal., 9 (1989), p. 199.
- [115] A. W. Snyder and F. Ladouceur, Optis and Photonics News, 10 (1999), p. 35.
- [116] J. M. Soto-Crespo, D. R. Heatley, E. M. Wright, and N.Ñ. Akhmediev, *Stability of the higher-bound states in a saturable self-focusing medium*, Phys. Rev. A, 44 (1991), pp. 636–644.
- [117] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, *Optical confinement of a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett., 80.
- [118] G. I. Stegeman and M. Segev, *Optical spatial solitons and their interactions: universality and generality*, Science, 286 (1999), pp. 1518–1528.
- [119] A. Stepken, M. R. Belić, F. Kaizer, W. Kroólikowski, and B. Luther-Davies, *Three dimensional trajectories of interacting incoherent photorefractive solitons*, Phys. Rev. Lett., 82 (1999), p. 540.
- [120] J. Stoer and R. Burlisch, *Introduction to Numerical Analysis*, Texts in Applied Mathematics, Springer-Verlag, 2nd ed., 1993.
- [121] S. Stringari, *Collective excitations of a trapped Bose-condensed gas*, Phys. Rev. Lett., 77.
- [122] ———, *Moment of inertia and superfluidity of a trapped Bose gas*, Phys. Rev. Lett., 76.
- [123] A. A. Svidzinsky and A. L. Fetter, *Normal modes of a vortex in a trapped Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A, 58.
- [124] ———, *Dynamics of a vortex in a trapped Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A, 62 (2000), p. 063617.
- [125] J. M. Thompson and S. R. Bishop, eds., *Nonlinearity and Chaos in Engineering Dynamics*, John Wiley and Sons, New York, 1994.
- [126] J. M. Thompson and H. B. Stewart, *Nonlinear Dynamics and Chaos*, John Wiley and Sons, New York, 1986.

-
- [127] L. Tisza, *Nature*, 141 (1938), p. 913.
 - [128] V. E. Zaharov and A. B. Shabat, *Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media*, *Sov. Phys. JETP*, 34 (1972), pp. 62–69.
 - [129] F. Zambelli and S. Stringari, *Quantized vortices and collective oscillations of a trapped Bose-Einstein condensate*, *Phys. Rev. Lett.*, 81.
 - [130] A. A. Zozulya and D. Z. Anderson, *Propagation of an optical beam in a photorefractive medium in the presence of a photogalvanic nonlinearity or an externally applied electric field*, *Phys. Rev. A*, 51 (1995), p. 1520.