

Esferas rígidas en una trampa armónica unidimensional

Maria Julia Maristany

Bajo la dirección de Dr. Pablo Serra

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación

Universidad Nacional de Córdoba

Abril 2018

Esta obra se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/).



Resumen

En este trabajo se intenta presentar un marco teórico que permita la descripción de un sistema unidimensional compuesto por pocas partículas interactuantes mediante un potencial de esferas rígidas atrapadas en una trampa armónica. Se busca mejorar la descripción del sistema introduciendo un potencial que dé cuenta del tamaño de las partículas. El potencial de esferas rígidas introduce entonces el efecto que el radio de las partículas tiene sobre el espectro de energías y las funciones de onda del sistema. Finalmente, se estudia el efecto de introducir impurezas en un sistema de tres partículas.

Abstract

In this thesis we attempt to present a theoretical framework that allows the description of a one dimensional system of few particles interacting by a hard spheres potential, trapped in a one dimensional harmonic trap. We seek to improve the description of the system by introducing a potential that incorporates the size of the particles. The hard spheres potential then introduces the effect that the radius of the particles has on the energy spectrum and the wave functions of the system. Finally, we studied the effect of introducing impurities in a three particle system.

Agradecimientos

Me gustaría expresar mi sincera gratitud...

...A mi director, Pablo Serra, por su invaluable ayuda, tanto en el marco de este trabajo como en muchos otros aspectos de mi vida académica.

...Al tribunal de la defensa del presente trabajo, Gustavo Castellano y Federico Pont, por su gran ayuda, correcciones y comentarios.

...A todos los profesores de los cuales tuve la buena fortuna de aprender. En especial a Carlos Briozzo, por siempre estar dispuesto a apoyarme en cualquier proyecto que yo desee emprender.

...A mis amigos de la facultad, por las risas y las horas de estudio juntos. A Zaira, por asegurarse que ningún libro me trague por completo. Y a todos mis amigos, por el tiempo compartido.

...A mi querida familia, en especial a mis padres, Arturo y Silvina, y a mi hermano Gastón, por acompañarme y por el cariño y apoyo incondicional que me muestran cada día. Para ellos, mi gratitud es infinita.

Índice general

Resumen	I
Abstract	II
Agradecimientos	III
Índice de Figuras	VI
Índice de cuadros	VIII
1. Introducción	1
2. Dos esferas rígidas en un potencial armónico	3
2.1. Oscilador armónico en presencia de una delta de Dirac en el origen	3
2.2. Problema de dos esferas rígidas distinguibles	8
2.3. Efectos de indistinguibilidad en el problema de dos partículas	16
3. Tres esferas rígidas en un potencial armónico	19
3.1. Método variacional de Rayleigh-Ritz	19
3.1.1. Método de Rayleigh-Ritz: dos esferas rígidas	21
3.2. Problema de tres esferas rígidas distinguibles	24
3.2.1. Autovalores del sistema	29
3.2.2. Convergencia del método variacional	30
3.2.3. Densidad de probabilidad del sistema	33
3.3. Efectos de indistinguibilidad en el problema de tres partículas	36
4. N esferas rígidas en un potencial armónico	37
4.1. Generalización del Hamiltoniano del sistema	37
4.1.1. Sistema de 4 partículas	42
4.1.1.1. Autovalores y convergencia	42
4.1.1.2. Densidad de probabilidad del sistema	43
5. Efectos de impurezas en sistemas de esferas rígidas en trampas armónicas	46
5.1. Impurezas en sistemas de dos partículas	46
5.2. Impurezas en sistemas de tres partículas	47
5.2.1. Caso donde la impureza se encuentra en un extremo	47

5.2.1.1. Autovalores	50
5.2.1.2. Densidad de probabilidad del sistema	51
5.2.2. Caso donde la impureza se encuentra en el medio	52
5.2.2.1. Autovalores del sistema	54
6. Conclusiones y Perspectivas	56
A. Integrales de polinomios de Hermite	58
Bibliografía	62

Índice de figuras

2.1. Solución numérica de la ecuación de autovalores de un oscilador armónico unidimensional con una función delta $g\delta(x)$, dependiente del parámetro g .	7
2.2. Función $H_\lambda(v)e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\lambda = 6.5$.	11
2.3. Función $H_\lambda(v)e^{-\frac{v^2}{2}}$ e con $\lambda = 0.75$.	12
2.4. Estado fundamental no normalizado del Hamiltoniano h_v de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_1$ y $\lambda = 6.5$.	13
2.5. Primer estado excitado no normalizado del Hamiltoniano h_v de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_2$ y $\lambda = 6.5$.	13
2.6. Segundo estado excitado no normalizado del Hamiltoniano h_v de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_3$ y $\lambda = 6.5$.	14
2.7. Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = 0$,	15
2.8. Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = 0.5$,	15
2.9. Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = \pm\infty$.	16
3.1. Convergencia de la energía del estado fundamental para el caso $b = 1$, junto con el valor extrapolado de la energía.	24
3.2. Autovalores del Hamiltoniano h_{XY} , dependientes del diámetro b , para una base variacional de tamaño $M = 30^2$.	30
3.3. Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 0$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental,	31
3.4. Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 1$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental,	32
3.5. Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 4$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental.	32
3.6. Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas y diámetros $b \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 30^2$.	34
3.7. Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas y diámetros $b \leq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 30^2$.	34
3.8. Comparación de los cálculos clásico (línea negra) y cuántico (línea roja) del valor de expectación de $x = x_3$, esto es, la posición de la partícula de un extremo.	35

4.1. Primeros 5 autovalores ϵ del Hamiltoniano de coordenadas relativas de cuatro partículas, dependientes del diámetro b , con una base variacional de 22 polinomios de Hermite de una partícula, esto es, $M = 22^3$	42
4.2. Convergencia de las cotas de la energía para el estado fundamental del Hamiltoniano de las coordenadas relativas de cuatro partículas, para el caso $b = 0$	43
4.3. Densidad de probabilidad de sistemas con cuatro partículas y diámetros $b \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 22$ polinomios de una partícula, esto es $M = 22^3$	44
4.4. Densidad de probabilidad de sistemas con cuatro partículas y diámetros $b \leq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 22^3$	45
5.1. Autovalores mas bajos del sistema con una impureza en un extremo, con $a = d = 1$ y una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.	50
5.2. Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas, con una impureza de masa $m \geq 1$ en un extremo, y diámetros $b = d \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.	51
5.3. Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas, con una impureza de masa $m \leq 1$ en un extremo, y diámetros $b = d \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.	52
5.4. Autovalores más bajos del sistema con una impureza en el medio, con $b = d = 1$ y una base variacional de 30 polinomios de Hermite de una partícula.	54

Índice de cuadros

3.1. Autovalores del Hamiltoniano h_v para dos partículas de acuerdo al método de Rayleigh-Ritz, para $b=1$	23
---	----

Capítulo 1

Introducción

El oscilador armónico es indudablemente uno de los sistemas más estudiados en la mecánica cuántica. El problema de una partícula en un potencial armónico es simple de resolver exactamente [1, 2], y tiene una considerable variedad de aplicaciones. Una gran cantidad de fenómenos físicos pueden modelarse de manera realista utilizando aproximaciones armónicas como por ejemplo, una partícula moviéndose cerca del mínimo de un potencial [3] o las vibraciones de una red cristalina [4], incluso el estudio de campos cuánticos puede analizarse, hasta cierto punto, desde el formalismo de osciladores armónicos [5]. El estudio del oscilador armónico resulta entonces de vital importancia, ya que nos provee de una herramienta desde la cual se pueden comenzar a estudiar sistemas mucho más complejos [6].

El estudio de sistemas con pocas partículas resulta también de gran importancia para muchos problemas de la física. Entre otros, tiene numerosas aplicaciones en el marco de la computación cuántica: los llamados *quantum dots*, o puntos cuánticos, son estructuras que pueden modelarse como sistemas de pocas partículas [7] con considerables aplicaciones para el desarrollo de tecnologías basadas en la información cuántica [8]. Las soluciones de problemas de pocas partículas funcionan, en numerosas ocasiones, como base para la descripción de sistemas más complejos a bajas temperaturas [9–12]. El interés en el estudio de partículas atrapadas en trampas armónicas unidimensionales se vio renovado en los últimos años debido a los avances experimentales que permiten el confinamiento de una cantidad controlada de partículas en dichas trampas [13].

Así, al ampliarse las posibilidades experimentales, estudios teóricos que permiten una descripción analítica del sistema cobran importancia. Trabajos como el de D’Amico y Rontani [14] analizan el espectro de energías de tres átomos atrapados en un potencial armónico interactuando mediante un potencial de contacto. Sin embargo, no es estudiado en dicho trabajo el efecto que tiene el radio de las partículas sobre el espectro, ya que estas

son consideradas puntuales. El objetivo de este trabajo consiste en estudiar los efectos que el radio de las partículas tiene sobre el espectro y los autoestados del sistema.

El trabajo está estructurado de la siguiente manera, siguiendo una serie de objetivos particulares: en primer lugar, en la sección 2.1 del Capítulo 2 se estudiará de forma analítica un sistema de una partícula en un potencial armónico con una función δ de Dirac en el origen. En la siguiente sección, 2.2, se busca relacionar este problema, exactamente soluble, con el de dos partículas interactuando mediante un potencial de contacto de esferas rígidas en una trampa armónica. En la última sección del capítulo, 2.3, analizamos los efectos que la indistinguibilidad de las partículas puedan tener sobre las funciones de onda y las energías. El objetivo de esta parte del trabajo es el ordenar y completar la descripción ya existente en la literatura de parte de dichos problemas [14, 15], y el de comenzar a familiarizarnos con las herramientas necesarias para resolver sistemas más complejos.

En el Capítulo 3 analizaremos un sistema de tres esferas rígidas en el mismo potencial armónico. Para ello, en primer lugar describimos en la sección 3.1 el método variacional de Rayleigh-Ritz, ejemplificando el mismo con un sistema de dos esferas rígidas. En la siguiente sección, 3.2, buscamos una descripción adecuada del Hamiltoniano del problema en el formalismo de operadores creación y aniquilación, el cual luego resolveremos aplicando el método variacional de Rayleigh-Ritz.

En el Capítulo 4 buscamos extender dicha descripción a un gas unidimensional de N partículas, interactuando mediante el mismo potencial de contacto. En el capítulo 5 analizaremos efectos de impurezas, en particular en sistemas de tres partículas, con el objetivo de determinar qué efectos pueden introducir los radios de dichas partículas en un sistema como los descritos. Finalmente, conclusiones y perspectivas del trabajo son presentadas en el Capítulo 6.

Capítulo 2

Dos esferas rígidas en un potencial armónico

En este capítulo estudiamos un sistema de dos partículas interactuantes mediante un potencial de esferas rígidas, en una trampa armónica unidimensional.

En primer lugar, resolvemos exactamente el espectro y las autofunciones de un oscilador armónico con una función delta en el origen. Luego, relacionamos la solución encontrada con el sistema de dos partículas que deseamos estudiar.

La resolución del problema de dos partículas nos permite comenzar a familiarizarnos con los elementos matemáticos que utilizaremos para resolver el problema de tres partículas, y eventualmente, para estudiar la generalización a N esferas rígidas. Finalmente, analizamos los efectos de indistinguibilidad de las partículas en el espectro de energías del sistema.

2.1. Oscilador armónico en presencia de una delta de Dirac en el origen

La solución del problema unidimensional de una partícula en un potencial armónico es ampliamente conocida [1, 2]. El Hamiltoniano de un oscilador armónico cuántico, tomando variables adimensionales, está dado por

$$h = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2, \quad (2.1)$$

en donde el sistema de unidades está definido por $\hbar = 1$, $m = 1$ y $\omega = 1$, o equivalentemente, mediante el reescalo de la variable x de la forma $x \rightarrow \frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{mw}}}$. Este cambio implica también un reescalo en la energía, de la forma $E \rightarrow \frac{E}{\hbar\omega}$. El sistema tiene como autoestados

$$\Psi_n(x) = C_n e^{-x^2/2} H_n(x), \quad (2.2)$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$. Aquí, $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite de orden n y C_n una constante de normalización, cuyo valor esta dado por

$$C_n = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{1}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.3)$$

La energía asociada a cada autoestado es $\epsilon_n = n + \frac{1}{2}$.

Buscamos ahora la solución del problema de los estados ligados de una partícula en un potencial armónico con una función delta de Dirac en el origen. Este es un problema también conocido [15], cuyo Hamiltoniano, en su formulación algebraica, es

$$h = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + g\delta(x). \quad (2.4)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo toma entonces la forma

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 \Psi(x) + g\delta(x) \Psi(x) = \epsilon \Psi(x). \quad (2.5)$$

Como el Hamiltoniano (2.4) es invariante frente a inversiones espaciales, las autofunciones $\Psi(x)$ del mismo deben tener paridad definida [2].

Al tratar de encontrar cuales son las autofunciones de Hamiltonianos que involucran potenciales con una función delta $\delta(x)$, usualmente se resuelve la ecuación de Schrödinger a ambos lados de la delta y se construye la función de onda imponiendo condiciones de continuidad para dicha función, siempre recordando que hay una discontinuidad en la primera derivada de las soluciones pares en el punto donde se encuentra la delta de Dirac. Para construir $\Psi(x)$ usaremos que ya conocemos las soluciones para $x > 0$. Dichas soluciones, junto con las condiciones de paridad, continuidad de la función de onda y discontinuidad de su primera derivada¹ para las autofunciones pares, nos permiten construir las soluciones de (2.5) para todo x .

¹debido a la presencia de la delta de Dirac en el origen

El caso donde $\Psi(x)$ es impar es el más sencillo. Si $\Psi(x)$ es impar entonces $\Psi(0) = 0$. Las soluciones de la ecuación de Hermite con esta condición de contorno son las soluciones impares del oscilador armónico (2.1), compuestas, como ya lo describimos, por el producto de los polinomios de Hermite de orden impar por la función $e^{-x^2/2}$ y una constante de normalización, esto es, $C_n H_n(x) e^{-x^2/2}$ con $n = 1, 3, 5, \dots$, con lo que obtenemos $\epsilon = n + \frac{1}{2}$. Vemos que los autoestados impares del Hamiltoniano no se ven afectados por el cambio que la función delta introduce en el potencial, ya que

$$\int \Psi_{2k+1}(x) \delta(x) dx = 0, \quad (2.6)$$

con lo que para las soluciones que involucran los polinomios de Hermite de orden impar, se puede ignorar el cambio en el potencial que genera la delta en la ecuación de Schrödinger (2.5).

Para construir las soluciones pares de (2.5), recordamos que en este caso tenemos una discontinuidad en la primera derivada de la función de onda. La magnitud de esta discontinuidad puede calcularse fácilmente integrando la ecuación de Schrödinger (2.5) en una región infinitesimal alrededor de $x = 0$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} \Big|_{-\epsilon}^{\epsilon} + g \Psi(0) \right) = 0, \quad (2.7)$$

con lo que obtenemos

$$\Psi'_{x \rightarrow 0^+}(x) - \Psi'_{x \rightarrow 0^-}(x) = 2g \Psi(0). \quad (2.8)$$

Para resolver (2.5) proponemos el Ansatz usual, $\Psi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \phi(x)$, y la ecuación (2.5) se convierte en

$$\phi''(x) - 2x\phi'(x) + (2\epsilon - 1 - 2g\delta(x))\phi(x) = 0. \quad (2.9)$$

Para $x \neq 0$, y al definir $2\epsilon - 1 = 2\lambda$, la ecuación (2.9) se convierte en la ecuación diferencial de Hermite. Las dos soluciones linealmente independientes de dicha ecuación son las funciones de Hermite $H_\lambda(x)$ y $G_\lambda(x)$ [16]. Al analizar la forma asintótica de estas funciones [17]

$$H_\lambda(x) \rightarrow (2x)^\lambda \quad \text{para } x \rightarrow \infty, \quad (2.10)$$

y

$$G_\lambda(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma(\lambda + 1) e^{x^2} x^{-\lambda-1} \quad \text{para } x \rightarrow \infty, \quad (2.11)$$

vemos que G_λ diverge para $x \rightarrow \infty$ como e^{x^2} , mientras que H_λ diverge como $e^{\lambda \ln(x)}$. Las funciones de Hermite H_λ en general tampoco son normalizables en el intervalo $(-\infty, \infty)$, excepto en el caso $\lambda = n$, donde n es un número entero. En ese caso, estamos hablando de los polinomios de Hermite. Sin embargo, H_λ sí es normalizable, cuando es pesada por $e^{-\frac{x^2}{2}}$, en el intervalo $[x_0, \infty)$ [17]. De esta manera, trabajaremos con la solución $H_\lambda(x)$ con $x \geq 0$, y luego buscaremos extender esta solución de forma par a todo el intervalo de x reales. Extendemos la función de la forma:

$$\phi(x) = \begin{cases} H_\lambda(x) & x > 0 \\ H_\lambda(-x) & x < 0. \end{cases} \quad (2.12)$$

Alternativamente, podemos escribir $\phi(x) = H(|x|)$. Imponemos la condición de discontinuidad en la primera derivada

$$\phi'_{x \rightarrow 0^+}(x) - \phi'_{x \rightarrow 0^-}(x) = 2g\phi(0). \quad (2.13)$$

Usando las relaciones

$$H'_\lambda(x) = 2\lambda H_{\lambda-1}(x), \quad (2.14)$$

y

$$H_\lambda(0) = \frac{2^\lambda \sqrt{\lambda}}{\Gamma(1 - \frac{\lambda}{2})}, \quad (2.15)$$

obtenemos la siguiente relación fundamental para los autovalores relacionados a las autofunciones pares

$$\lambda = g \frac{\Gamma(1 - \frac{\lambda}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2})}. \quad (2.16)$$

En la figura (2.1) se puede observar un gráfico de los autovalores λ en función del parámetro g , esto es, la solución numérica de la ecuación (2.16). Podemos analizar algunas características del espectro que encontramos.

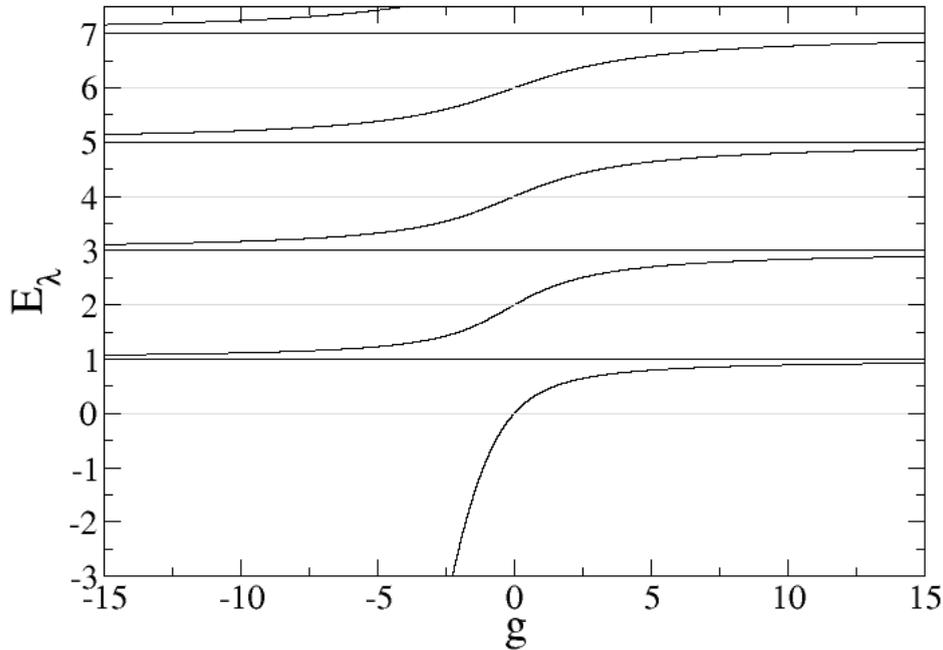


FIGURA 2.1: Solución numérica de la ecuación de autovalores de un oscilador armónico unidimensional con una función delta $g\delta(x)$, dependiente del parámetro g .

Notamos que la solución completa de los autovalores del Hamiltoniano se encuentra resolviendo de forma numérica la ecuación (2.16). Esto se debe a que los valores impares de λ corresponden a polos de dicha ecuación, y aparecen entonces como soluciones numéricas de la igualdad.

Como esperamos, cuando $g \rightarrow 0$, obtenemos $\lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$, que son los autovalores ya conocidos del problema de una partícula en un potencial armónico sin la delta de Dirac.

En el caso $g \rightarrow \infty$, vemos que los autovalores son ahora $\lambda = 1, 3, 5, \dots$, degeneran asintóticamente a las autoenergías de los autoestados impares del Hamiltoniano de un oscilador armónico. Este caso se corresponde a una barrera de potencial en $x = 0$. La condición sobre la función de onda para barreras de potencial infinitas es $\varphi(x) = 0$ dentro de la barrera. Esta condición se traduce a $\varphi(0) = 0$. De las funciones de Hermite H_λ , las únicas que cumplen esa condición son los polinomios de Hermite de orden impar. Las soluciones impares corresponden a dichos polinomios. Las soluciones pares se ven

construidas extendiendo la función $H_\lambda(|x|)$ con $\lambda = 1, 3, 5, \dots$, y en este caso, estas funciones tienden asintóticamente a cumplir la condición $\varphi(x) = 0$, por lo que tenemos, para cada $\lambda = 1, 3, 5, \dots$, dos autofunciones que son solución de la ecuación. Así, para el límite $g \rightarrow \infty$ los autovalores están degenerados.

El caso $g \rightarrow -\infty$ corresponde a un pozo de potencial en $x = 0$. En este caso, recuperamos los autovalores $\lambda = 1, 3, 5, \dots$, correspondientes a aquellos autoestados nulos en el origen, esto es, aquellos autoestados no afectados por la presencia de la delta de Dirac. Sin embargo, algo curioso ocurre con el estado fundamental. Recordamos que las soluciones de los estados ligados de una partícula en un potencial descrito únicamente por una delta de Dirac atractiva $V(x) = -\beta\delta(x)$ tienen una sola posible energía [2]

$$E_\beta = -\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}. \quad (2.17)$$

Si $\beta \rightarrow \infty$, entonces $E_\beta \rightarrow -\infty$. Esto explica el comportamiento del estado ligado fundamental de este sistema. Su energía es tan baja que no se ve afectada por el potencial armónico, y se comporta como un estado ligado en una delta de Dirac. De esta forma, la función de onda representa una densidad que colapsa en el espacio a $x = 0$.

2.2. Problema de dos esferas rígidas distinguibles

Estudiaremos ahora el problema de dos partículas de tamaño finito atrapadas en un potencial armónico unidimensional, distinguibles e interactuantes mediante un potencial de esferas rígidas. El Hamiltoniano toma la forma

$$H = h_1 + h_2 + w(x_1, x_2), \quad (2.18)$$

donde los subíndices numeran partículas, h_i son los Hamiltonianos de una partícula en un potencial armónico canónico (2.1) y $w(x_1, x_2)$ el potencial de interacción. Al ser las partículas distinguibles, tomamos sin pérdida de generalidad $x_1 < x_2$. Las partículas interactúan mediante un potencial de esferas rígidas

$$w(x_1, x_2) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_2 - x_1 \leq \tilde{b} \\ 0 & \text{si } x_2 - x_1 \geq \tilde{b} \end{cases}, \quad (2.19)$$

donde $\tilde{b} = r_1 + r_2$, con r_i siendo el radio de la partícula i .

Como la dependencia del potencial de interacción es de la forma $w(|x_2 - x_1|)$, el cambio de variables a una coordenada de centro de masa y una coordenada relativa

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \\ v &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1), \end{aligned} \tag{2.20}$$

nos permite desacoplar el Hamiltoniano (2.18) en $H = h_u + h_v$.

$$\begin{aligned} h_u \varphi(u) &= \epsilon_u \varphi(u), \\ h_v \psi(v) &= \epsilon_v \psi(v). \end{aligned} \tag{2.21}$$

El factor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ aparece en las coordenadas para que la transformación sea unitaria. De ahora en adelante, también tomamos $b = \frac{\tilde{b}}{\sqrt{2}}$

La solución al problema de autovalores

$$H\Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2), \tag{2.22}$$

será entonces

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, x_2) &= \varphi(u)\psi(v), \\ E &= \epsilon_u + \epsilon_v. \end{aligned} \tag{2.23}$$

La coordenada u de centro de masa da lugar a un Hamiltoniano equivalente a una partícula en un oscilador armónico

$$h_u = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} u^2, \tag{2.24}$$

cuya solución ya conocemos

$$\varphi_n(u) = C_n e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u), \tag{2.25}$$

$$\epsilon_u = n + \frac{1}{2}. \tag{2.26}$$

El potencial de interacción queda entonces incluido exclusivamente en el Hamiltoniano dependiente de la variable v de la siguiente manera

$$h_v = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dv^2} + \frac{1}{2} v^2 + w(v), \quad (2.27)$$

donde

$$w(v) = \begin{cases} \infty & \text{si } v \leq b \\ 0 & \text{si } v > b. \end{cases} \quad (2.28)$$

Para resolverlo, notamos que podemos reemplazar el potencial de interacción en el Hamiltoniano (2.27) con una condición de contorno sobre los autoestados. Debido a la forma del potencial de interacción, cualquier solución de la ecuación

$$h_v \psi(v) = \epsilon_v \psi(v), \quad (2.29)$$

debe satisfacer que si $v \leq b$, entonces $\psi(v) = 0$. También notamos que cuando $v > b$, entonces el Hamiltoniano (2.27) es simplemente el Hamiltoniano de un oscilador armónico. Así, podemos reescribir el potencial $w(v)$ como una condición de contorno para la función de onda

$$\psi(b) = 0, \quad (2.30)$$

donde la función $\psi(v)$, para $v > b$, corresponde a una solución de la ecuación

$$\frac{d^2}{dv^2} \psi(v) + v^2 \psi(v) = \epsilon_v \psi(v). \quad (2.31)$$

Las soluciones de (2.31) que no divergen cuando $v \rightarrow \infty$ son

$$\psi(v) = C_\lambda H_\lambda(v) e^{-\frac{v^2}{2}}, \quad (2.32)$$

donde $\lambda = \epsilon_v - \frac{1}{2}$ y C_λ está definido de forma que la función de onda cumpla la condición de normalización

$$\int_b^\infty |\psi_\lambda(v)|^2 dv = 1. \quad (2.33)$$

Es debido a la condición de normalización de la función de onda que debemos descartar las soluciones que involucran las funciones de Hermite $G_\lambda(v)$, ya que las mismas

generan una función de onda no normalizable, como se puede ver por la forma asintótica (2.11) de G_λ .

El problema se reduce entonces a encontrar aquellos valores de λ para los cuales se cumple la condición

$$H_\lambda(b) = 0. \quad (2.34)$$

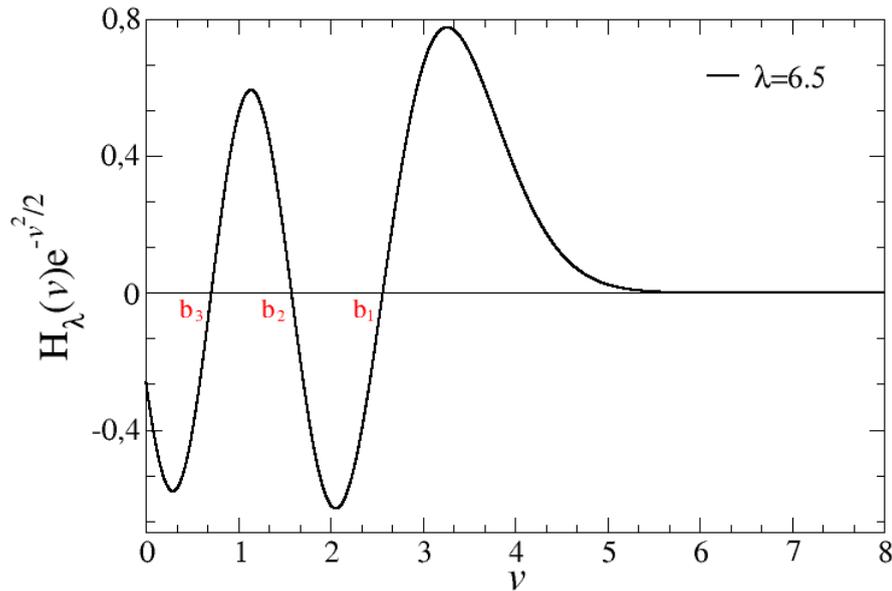
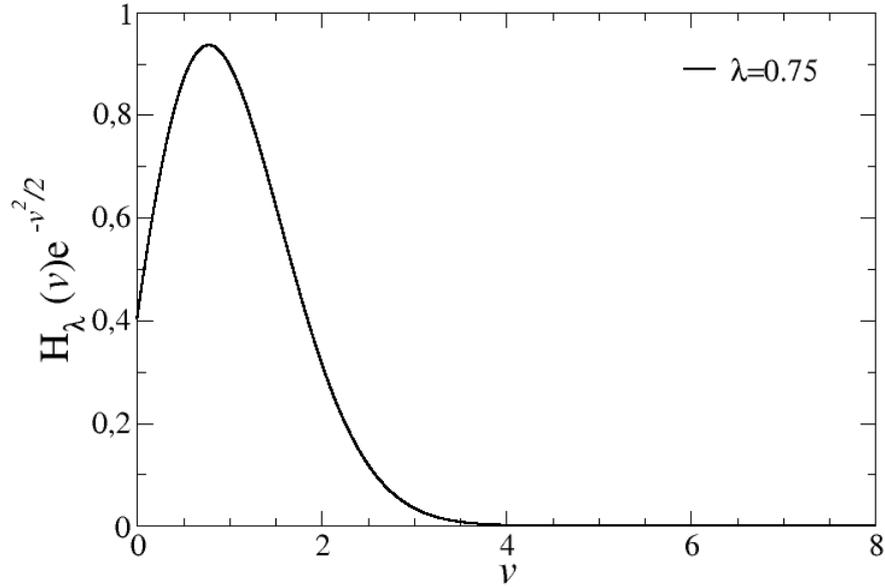


FIGURA 2.2: Función $H_\lambda(v)e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\lambda = 6.5$.

La figura (2.2) muestra el comportamiento de la función de $H_\lambda(v)e^{-\frac{v^2}{2}}$, particularizada para $\lambda = 6.5$. Los ceros de dicha función están marcados como b_i . Recordamos que los polinomios de Hermite de orden n tienen n ceros en el rango $(-\infty, \infty)$, y al tener paridad definida, esto implica que poseen $\frac{n}{2}$ ceros en el rango $(0, \infty)$ si n es par, y $\frac{n+1}{2}$ si n es impar. De esta forma, como las funciones de Hermite varían continuamente en λ , tendrá la misma cantidad de ceros que el polinomio de Hermite de orden n , tal que n sea el mayor entero posible que cumpla $n \leq \lambda$. Este comportamiento de los ceros de funciones de Hermite implica que ningún $\lambda < 1$ representa una solución para ningún radio b posible de nuestro sistema, ya que dicho conjunto de funciones no tienen nodos. La figura (2.3) ilustra una de estas funciones.


 FIGURA 2.3: Función $H_\lambda(v)e^{-\frac{v^2}{2}}$ e con $\lambda = 0.75$.

Cada función de Hermite H_λ provee entonces k soluciones para nuestro sistema, donde k es la cantidad de ceros de la función de H_λ en el intervalo $[0, \infty)$,

$$k = \begin{cases} \frac{[\lambda]}{2} & \text{si } \lambda \neq 2n + 1 \\ n + 1 & \text{si } \lambda = 2n + 1. \end{cases} \quad (2.35)$$

Esto es, si la función tiene un conjunto de $\{b_i\}_1^N$ ceros ordenados de mayor a menor, entonces la función $\psi_{\lambda,i}$ es solución de (2.27), con

$$\psi_{\lambda,i}(v) = \begin{cases} 0 & \text{si } v \leq b_i \\ C_{\lambda,i} H_\lambda(v) e^{-\frac{v^2}{2}} & \text{si } v \geq b_i. \end{cases} \quad (2.36)$$

La función $\psi_{\lambda,1}$ corresponde al estado fundamental de (2.27) para el caso de dos partículas con b_1 , $\psi_{\lambda,2}$ corresponde al primer estado excitado para el caso de b_2 , $\psi_{\lambda,3}$ al segundo estado excitado para b_3 , y así sucesivamente. Esto se ilustra de manera más clara en las figuras (2.4)-(2.6), donde vemos que si definimos la función $\psi_{\lambda,i}$ de esta manera, la misma tiene $i - 1$ nodos, y por lo tanto corresponde o bien al estado fundamental, en el caso de $i = 1$, o bien al estado $(i - 1)$ -ésimo excitado, para dos partículas con b_i .

Estas funciones deberán ser luego renormalizadas mediante una apropiada elección de los $C_{\lambda,i}$, de acuerdo a (2.33). Hemos utilizado el mismo λ que en la figura (2.2), $\lambda = 6.5$.

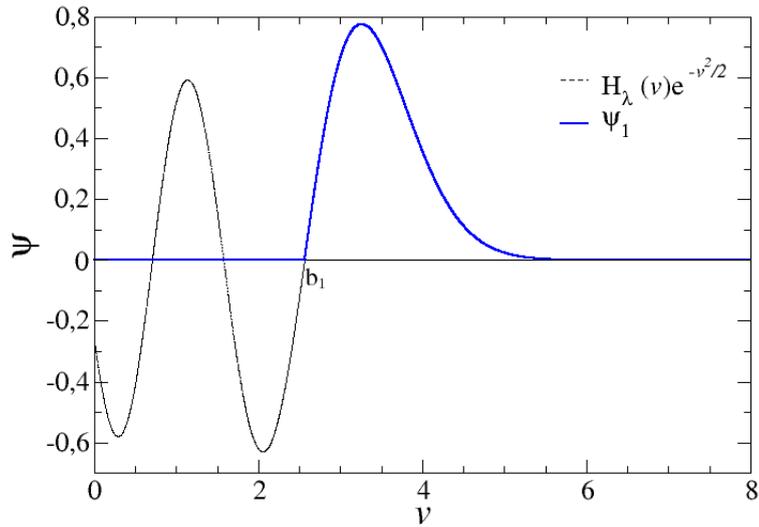


FIGURA 2.4: Estado fundamental no normalizado del Hamiltoniano h_v de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_1$ y $\lambda = 6.5$.

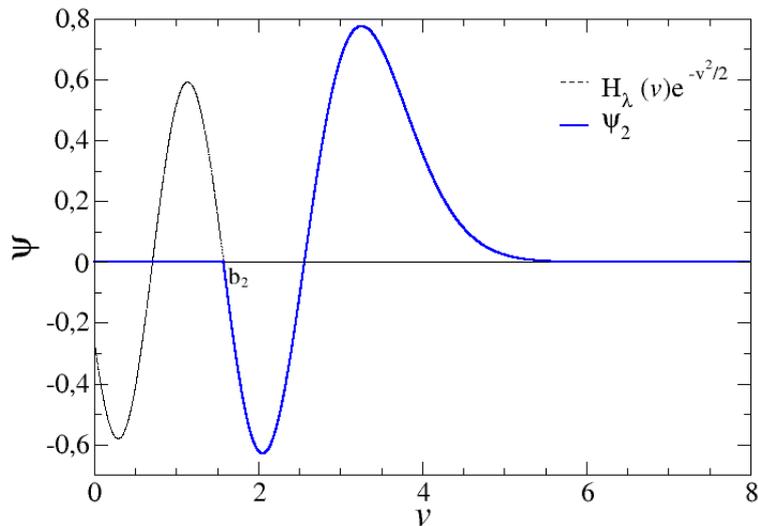


FIGURA 2.5: Primer estado excitado no normalizado del Hamiltoniano h_v de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_2$ y $\lambda = 6.5$.

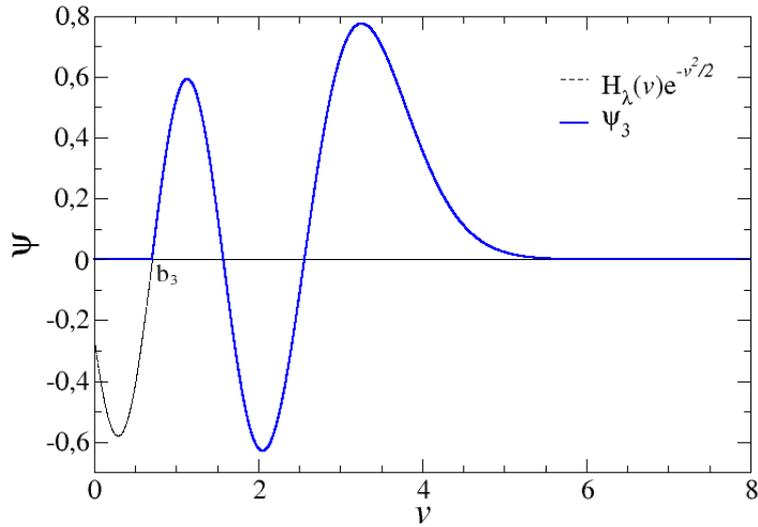


FIGURA 2.6: Segundo estado excitado no normalizado del Hamiltoniano h_ν de la coordenada relativa del problema de dos partículas para $b = b_3$ y $\lambda = 6.5$.

Buscamos traducir la condición (2.34) a una condición de contorno en el origen. En general, las condiciones de contorno más utilizadas son la condición de contorno de Dirichlet, que nos indica cual es el valor de la función en $x = 0$, y la condición de contorno de Neumann, la que nos da el valor de la primera derivada en $x = 0$ [18]. La condición de contorno de Robin es una combinación lineal de ambas, y toma la forma

$$f(v=0) + \alpha(b) \frac{\partial}{\partial v} f(v=0) = 0, \quad (2.37)$$

donde

$$f = H_\lambda(v) e^{-\frac{v^2}{2}}. \quad (2.38)$$

Haciendo uso de las relaciones (2.14) y (2.15), obtenemos que

$$\alpha(b) = \frac{1}{\lambda} \frac{\Gamma(1 - \frac{\lambda}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2})}. \quad (2.39)$$

Esta relación es idéntica a la ecuación para los autovalores (2.16) del problema de una partícula en un potencial armónico más una función delta en el origen.

Notamos que si $\alpha \rightarrow 0$, entonces obtenemos $\lambda = 1, 3, 5, \dots$, con lo que H_λ son entonces los polinomios de Hermite de orden impar. Si $\alpha \rightarrow \pm\infty$, entonces tenemos $\lambda = 2, 4, 6, \dots$ y H_λ se convierten en los polinomios de Hermite de orden par.

Para cada α tendremos un conjunto discreto infinito de autovalores λ posibles, que forman un conjunto completo bajo la condición de contorno (2.37). Esto se ilustra en las figuras (2.7) a (2.9).

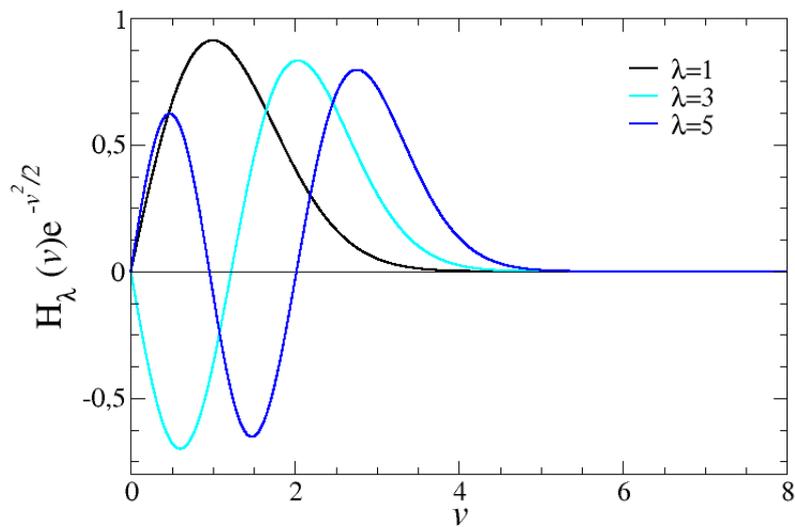


FIGURA 2.7: Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = 0$,

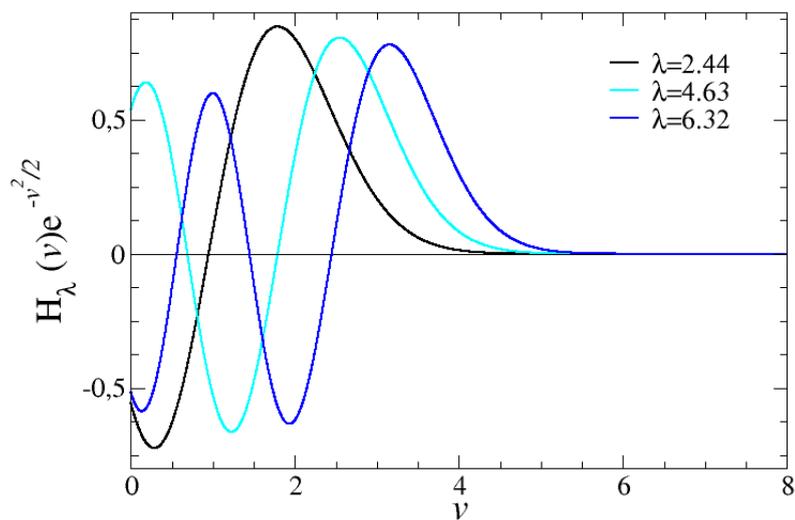
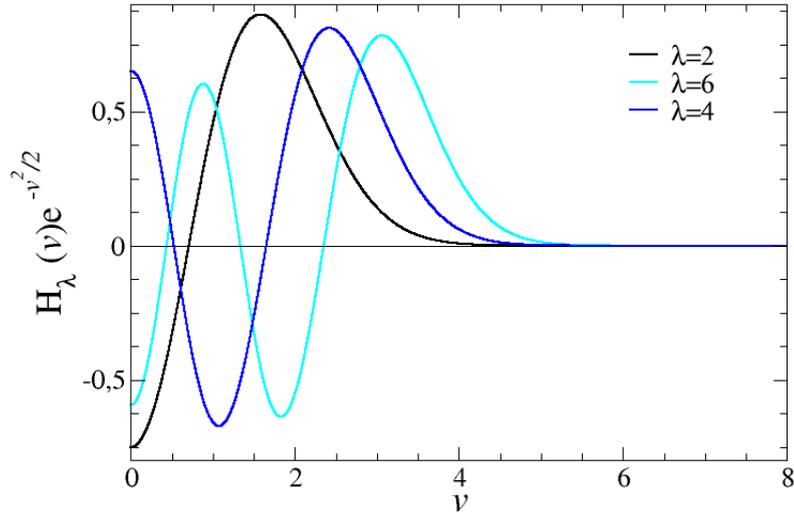


FIGURA 2.8: Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = 0.5$,


 FIGURA 2.9: Funciones $H_\lambda e^{-\frac{v^2}{2}}$ para $\alpha = \pm\infty$.

2.3. Efectos de indistinguibilidad en el problema de dos partículas

Hasta este punto del trabajo hemos sólo considerado un sistema cuyas partículas son distinguibles. Las autofunciones de dicho sistema, por lo tanto, no tienen ninguna condición sobre simetría o paridad que provenga de la naturaleza misma de las partículas.

Cuando se estudian los efectos de indistinguibilidad en un sistema de partículas, buscamos dentro del conjunto de soluciones de su Hamiltoniano aquellas que cumplan las condiciones que debemos imponer sobre las autofunciones, dependiendo de si estamos hablando de bosones o fermiones. Como bien sabemos, las autofunciones correspondientes a un sistema de fermiones deben ser antisimétricas ante un intercambio de partículas, mientras que las correspondientes a un sistema bosónico deben ser simétricas ante dicho intercambio. En términos matemáticos:

$$\begin{aligned} \Phi_F(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) &= -\Phi_F(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \\ \Phi_B(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) &= \Phi_B(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N) \end{aligned} \quad \forall i, j, \quad (2.40)$$

en donde F un sistema compuesto por fermiones y B indica un sistema compuesto por bosones. En este caso, estamos tratando partículas sin spin. En caso de considerar el spin,

las funciones deben simetrizarse o antisimetrizarse considerando también la variable del spin en la función de onda.

En el caso de dos partículas en una trampa armónica unidimensional, es fácil ver que cuando las mismas interactúan con un potencial de esferas rígidas, su función de onda tiene efectivamente una paridad definida, dada por la solución misma del Hamiltoniano. Recordamos que la solución al Hamiltoniano (2.18) de dos partículas distinguibles, donde $x_1 < x_2$ está dada por

$$\begin{aligned}\Psi(u, v) &= \varphi(u)\psi(v), \\ \varphi(u) &= C_n e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u), \\ \psi_\lambda(v) &= \begin{cases} 0 & \text{si } v \leq b \\ C_\lambda H_\lambda(v) e^{-\frac{v^2}{2}} & \text{si } v \geq b \end{cases},\end{aligned}\tag{2.41}$$

con $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, y donde habíamos definido las variables

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2); \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1),\tag{2.42}$$

y habíamos impuesto la condición de partículas distinguibles $x_1 < x_2$. Ahora, si no especificamos el orden de las partículas, podemos reescribir $\psi_{\lambda,i}(v)$ como

$$\begin{aligned}\psi_{\lambda,P}(v) &= \begin{cases} 0 & \text{si } |v| \leq b \\ C_\lambda H_\lambda(|v|) e^{-\frac{|v|^2}{2}} & \text{si } |v| \geq b \end{cases} \\ \psi_{\lambda,I}(v) &= \begin{cases} 0 & \text{si } |v| \leq b \\ sg(v) C_\lambda H_\lambda(|v|) e^{-\frac{|v|^2}{2}} & \text{si } |v| \geq b \end{cases},\end{aligned}\tag{2.43}$$

donde $\psi_{\lambda,P}(v)$ se corresponde a la solución par del Hamiltoniano (2.27), y $\psi_{\lambda,I}(v)$ a la solución impar. Al ser un Hamiltoniano par respecto a la variable v , sus autofunciones deben tener paridad definida [2], con lo que $\psi_{\lambda,P}(v)$ y $\psi_{\lambda,I}(v)$ son consistentes con esta descripción.

Es importante notar que tanto la autofunción par como la impar poseen el mismo autovalor λ asociado, y por lo tanto, tienen la misma energía. Existe una correspondencia uno a uno entre sistemas de bosones y fermiones impenetrables en una dimensión [19], y el espectro de energía de ambos sistemas es idéntico.

Volviendo a la solución del problema de dos partículas (2.41), notamos ahora que la autofunción completa del problema $\Psi(u, v) = \varphi(u)\psi(v)$ se compone del producto de

dos funciones con paridad definida, ya que los polinomios de Hermite H_n tienen todos paridad definida respecto de la variable u .

Volvamos al problema de la indistinguibilidad de las partículas. Las variables u y v se transforman de la siguiente manera, ante un intercambio de orden de las partículas

$$x_1 \leftrightarrow x_2 \implies \begin{cases} u \rightarrow u \\ v \rightarrow -v. \end{cases} \quad (2.44)$$

La variable de centro de masa u es simétrica respecto al intercambio de partículas. De esta forma, un intercambio de partículas implica sólo un cambio de signo en v . Sin embargo, habíamos determinado que $\psi(v)$ es una función con paridad definida. De esta manera, $\psi(v)$ es ya una función o bien simétrica o bien antisimétrica ante dicho intercambio, y es solución no sólo del problema distinguible, sino también de sistemas bosónicos y fermiónicos.

En conclusión, en el caso de dos esferas rígidas, la indistinguibilidad de las partículas no introduce cambios en el espectro energético, ni en las autofunciones. Esto es esperable, ya que al estar tratando con sistemas unidimensionales, la condición de esferas rígidas implica impenetrabilidad, y la barrera de potencial infinita, que genera un cero en la función de onda, impedirá la ocurrencia de *tunneling cuántico*.

Sin embargo, este resultado se sostiene sólo para el caso de esferas rígidas. En el caso de partículas que permitan cierto grado de penetrabilidad, con interacción denominada de *soft core*, la función de onda no posee el nodo mencionado, y debe simetrizarse o antisimetrizarse según el sistema estudiado. En ese caso, sí ocurren cambios en el espectro del sistema [14].

Capítulo 3

Tres esferas rígidas en un potencial armónico

En este capítulo estudiamos un sistema de tres partículas interactuando mediante un potencial de esferas rígidas en una trampa armónica unidimensional. En primer lugar, describimos el método de Rayleigh-Ritz, una técnica variacional que nos permitirá encontrar el espectro de energías y de autofunciones, a cualquier grado de aproximación deseado. Luego, planteamos el problema de tres partículas, proponemos un cambio de variable que permite convertir el potencial de interacción en una condición de contorno, y resolvemos el problema haciendo uso del método variacional descripto. Para ello, reescribimos el Hamiltoniano en términos de operadores creación y aniquilación, calculamos de forma analítica las integrales necesarias para la aplicación del método variacional, y computamos el espectro y las autofunciones del problema. Finalmente, analizamos los efectos de introducir indistinguibilidad en el sistema de partículas.

3.1. Método variacional de Rayleigh-Ritz

El método de Rayleigh-Ritz [20, 21] es un procedimiento variacional mediante el cual podemos dar cotas superiores para las autoenergías del Hamiltoniano de un sistema. Tomemos un conjunto de M funciones linealmente independientes $\{\varphi_i\}_{i=1}^M$ que expanden un subespacio \tilde{H} del espacio de Hilbert H en el cual se describe dicho sistema. Suponemos así que

$$\begin{aligned}\tilde{H} &\subseteq H, \\ \dim(\tilde{H}) &= M,\end{aligned}\tag{3.1}$$

y que las funciones base de \tilde{H} están normalizadas, pero que no son necesariamente ortogonales entre sí.

En general, tendremos

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \varphi_i, \\ \langle i|i\rangle &= \int |\varphi_i(x)|^2 dx = 1, \\ \langle i|j\rangle &= S_{ij} \neq \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Las integrales $\langle i|j\rangle$, es decir, los términos no diagonales de S, se denominan *integrales de overlap*. Diagonalizar S es equivalente a ortogonalizar la base, pero muchas veces resulta conveniente trabajar con bases no ortogonales, ya que las mismas pueden describir correctamente las simetrías del sistema.

El método de Rayleigh-Ritz consiste en plantear como solución del sistema un funcional del tipo

$$\Psi_P = \sum_{i=1}^M c_i \varphi_i(\vec{x}). \quad (3.3)$$

Los coeficientes c_i pueden ser complejos, y deben ser tales que minimicen el valor de expectación

$$\langle H \rangle_P = \frac{\langle \Psi_P | H | \Psi_P \rangle}{\langle \Psi_P | \Psi_P \rangle}, \quad (3.4)$$

Las ecuaciones resultantes de tomar entonces $\min_{\{c_i\}} \langle H \rangle_P$ son

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle H \rangle_P}{\partial \text{Re}(c_i)} &= 0, \\ \frac{\partial \langle H \rangle_P}{\partial \text{Im}(c_i)} &= 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Dado que

$$\langle H \rangle_P = \frac{\langle \Psi_P | H | \Psi_P \rangle}{\langle \Psi_P | \Psi_P \rangle} = \sum_{i,j=1}^M \frac{c_i^* c_j \langle i | H | j \rangle}{c_i^* c_j S_{ij}}, \quad (3.6)$$

podemos reescribir las ecuaciones (3.5) dadas por el principio variacional y obtener que los valores estacionarios de los coeficientes c_i están dados por la solución del problema clásico de autovalores generalizado,

$$\det(H - \lambda S) = 0, \quad (3.7)$$

donde los autovectores dan las distintas Ψ_P , y los λ cumplen la siguiente propiedad: sea $\lambda_0 = \min\{\lambda_i\}$, entonces si E_0 es la energía del estado fundamental del Hamiltoniano H del sistema que deseábamos estudiar, se cumple que $\lambda_0 \geq E_0$. De la misma manera, para el resto del espectro de energías discretas del Hamiltoniano H se cumple que, si ordenamos los valores λ de menor a mayor, entonces $\lambda_i \geq E_i$ para $i = 1, \dots, M$. Esto es cierto siempre que tengamos al menos M estados ligados en el espectro del Hamiltoniano. Cuando el potencial en el Hamiltoniano $V(x) \rightarrow \infty$ para $|x| \rightarrow \infty$, tenemos infinitos estados ligados, y podemos utilizar el método de Rayleigh-Ritz.

Las cotas λ de los valores de las energías forman una sucesión monótonamente decreciente a medida que aumentamos en tamaño de la base variacional M . Es importante notar que si bien el método variacional es una aproximación no controlada, esto es, no podemos determinar cual será la magnitud del error en la aproximación, en el límite $M \rightarrow \infty$, es decir, en el caso en el que nuestra base sea completa, la solución encontrada es exacta. Estudiando la convergencia con respecto a M podemos estudiar así el grado de aproximación del método al truncar la base.

3.1.1. Método de Rayleigh-Ritz: dos esferas rígidas

Ejemplificaremos el uso del método de Rayleigh-Ritz con el problema de dos esferas rígidas ya resuelto exactamente. Retomamos el análisis hecho en la sección 2.2. El cambio de variable

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \\ v &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1), \end{aligned} \quad (3.8)$$

nos permite desacoplar el centro de masa, y nuestro problema se reduce a resolver el Hamiltoniano

$$h_v = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dv^2} + \frac{1}{2} v^2 + w(v), \quad (3.9)$$

donde

$$w(v) = \begin{cases} \infty & \text{si } v \leq b \\ 0 & \text{si } v > b, \end{cases} \quad (3.10)$$

Ahora, para aplicar el método de Rayleigh-Ritz, en primer lugar realizaremos un nuevo cambio de variables, para poder utilizar una base variacional que cumpla de manera automática las condiciones de contorno. De esta manera definimos

$$\tilde{v} = v - b, \quad (3.11)$$

donde $b = \frac{\tilde{b}}{\sqrt{2}}$, con \tilde{b} siendo el diámetro de las partículas. Así el Hamiltoniano (3.9) es ahora

$$h_{\tilde{v}} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{v}^2} + \frac{1}{2} (\tilde{v}^2 + 2b\tilde{v} + b^2), \quad (3.12)$$

y la condición de contorno sobre la función de onda es ahora

$$\phi(0) = 0. \quad (3.13)$$

Los primeros términos de (3.12) corresponden a un oscilador armónico canónico. Considerando esto, la condición de frontera dada por (3.13) y que además $\tilde{v} \geq 0$, debido a la condición de distinguibilidad de las partículas, tomamos como base variacional las soluciones impares del oscilador armónico canónico, dadas por las funciones adecuadamente normalizadas en el intervalo $[0, \infty)$

$$|n\rangle = C_n H_n(\tilde{v}) e^{-\frac{\tilde{v}^2}{2}}. \quad (3.14)$$

donde hemos usado la notación de Dirac para representar las funciones. Las mismas son un conjunto de funciones linealmente independientes y normalizables en el intervalo $[0, \infty)$. Nuestra función variacional es entonces

$$\Psi_P = \sum_{i=0}^{M-1} c_{2i+1} |2i+1\rangle. \quad (3.15)$$

Utilizando esta base variacional, calculamos los elementos de matriz de (3.12) y diagonalizamos la matriz resultante para obtener las cotas λ_i de los autovalores mediante rutinas en Fortran90 [22].

Los resultados obtenidos para el estado fundamental en el caso $b = 1$ están ilustrados en la tabla (3.1). Allí podemos observar también el resultado exacto del autovalor, calculado con el método presentado en el capítulo anterior.

M	λ_0
2	3.04813271
3	3.03923416
4	3.03775930
5	3.03740393
10	3.03720685
15	3.03719785
20	3.03719630
25	3.03719586
30	3.03719570
35	3.03719562
40	3.03719558
Extrapolación	3.03719553
Exacto	3.03719553

CUADRO 3.1: Autovalores del Hamiltoniano h_v para dos partículas de acuerdo al método de Rayleigh-Ritz, para $b=1$.

En la tabla (3.1) podemos observar la convergencia del método. Con una base variacional de $M = 40$, obtenemos resultados correctos a nueve cifras significativas. Esto se ve ilustrado también en la figura (3.1), en donde hemos graficado los valores obtenidos, y un ajuste que nos permite extrapolar el valor de la energía para $M \rightarrow \infty$. Para extrapolar dicho valor, tomamos la energía del estado fundamental como

$$\epsilon_0 = \lim_{M \rightarrow \infty} \lambda_{0,M}, \tag{3.16}$$

y

$$\lambda_{0,M} \underset{M \rightarrow \infty}{\sim} \epsilon_0 + \frac{A}{M^\gamma}, \tag{3.17}$$

Este ajuste se encuentra también graficado en la figura (3.1) para $\gamma = 4.53$, y el valor extrapolado para $M \rightarrow \infty$ se encuentra en la tabla (3.1). Para este γ , el coeficiente de correlación del ajuste es $r = 0,998$. En la figura (3.1), la línea roja punteada indica la extrapolación realizada.

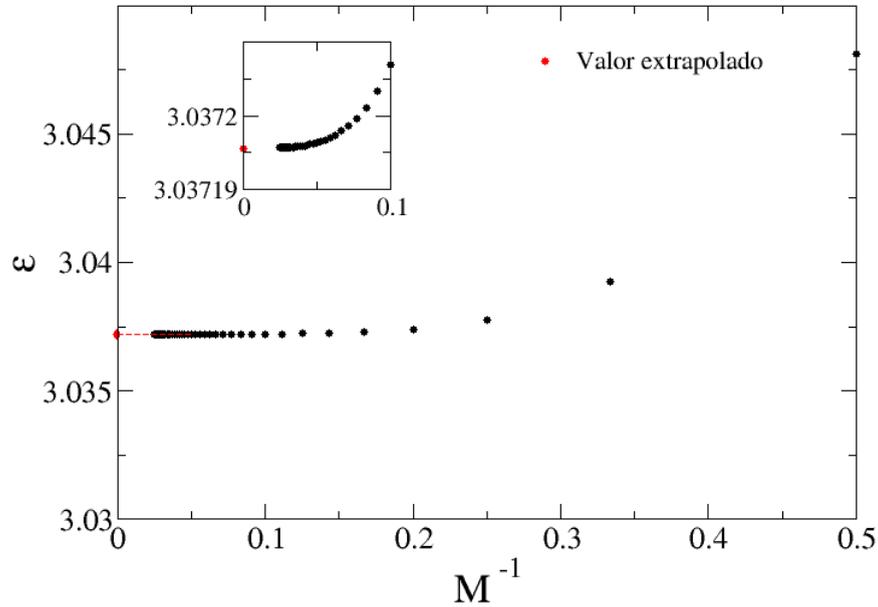


FIGURA 3.1: Convergencia de la energía del estado fundamental para el caso $b = 1$, junto con el valor extrapolado de la energía.

Podemos ver en la figura (3.1) que aunque la aproximación variacional sea no controlada, podemos encontrar una forma funcional que la ajusta y nos permite extrapolar los valores exactos. Esto es gracias a que las cotas forman una sucesión monótona decreciente acotada, y por lo tanto, convergente. Es posible entonces estimar el error que surge de truncar la base completa un M finito. En este ejemplo en particular, la cota para el estado fundamental converge al autovalor exacto a nueve cifras significativas, calculado mediante el método del capítulo anterior.

3.2. Problema de tres esferas rígidas distinguibles

Estudiaremos ahora el problema de tres partículas distinguibles e idénticas atrapadas en un potencial armónico unidimensional, interactuantes mediante un potencial de esferas rígidas. El Hamiltoniano del sistema toma la forma

$$H = h_1 + h_2 + h_3 + w(x_1, x_2, x_3), \quad (3.18)$$

donde, al igual que en (2.18) los subíndices numeran partículas, h_i son los Hamiltonianos de una partícula en un potencial armónico y $w(x_1, x_2, x_3)$ el potencial de interacción.

Como las mismas son distinguibles, asumiremos que $x_1 \leq x_2 \leq x_3$. Las partículas interactúan mediante el potencial

$$w(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_2 - x_1 \leq b \\ \infty & \text{si } x_3 - x_2 \leq b \\ 0 & \text{en cualquier otro caso,} \end{cases} \quad (3.19)$$

donde b es el diámetro de las partículas.

En este caso, el cambio de variables que proponemos para resolver el sistema es

$$\begin{aligned} x &= \frac{x_2 - x_1 - b}{4\sqrt{3}}, \\ y &= \frac{x_3 - x_2 - b}{4\sqrt{3}}, \\ z &= \frac{x_1 + x_2 + x_3}{\sqrt{3}}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

que nos permite reescribir el Hamiltoniano (3.18) como $H = h_{XY} + h_Z + b^2$. Las autofunciones tomarán la forma $\Phi(x, y, z) = \phi_Z(z)\phi_{XY}(x, y)$, y las autoenergías estarán dadas por $\epsilon = \epsilon_Z + \epsilon_{XY} + b^2$. Los Hamiltonianos en términos de las nuevas variables están dados por

$$h_Z = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} z^2, \quad (3.21)$$

y

$$h_{XY} = \frac{2}{\sqrt{3}} \left(h_X + h_Y \right) + \frac{1}{\sqrt{3}} \left(xy - \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) + 4\sqrt{3}b(x + y), \quad (3.22)$$

donde

$$\begin{aligned} h_X &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2, \\ h_Y &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} y^2, \end{aligned} \quad (3.23)$$

son los Hamiltonianos canónicos de un oscilador armónico unidimensional, y donde el potencial de contacto, al igual que en el caso de dos partículas, se ve transformado en las condiciones de contorno

$$\varphi_{XY}(x, 0) = 0 ; \varphi_{XY}(0, y) = 0. \quad (3.24)$$

Como nuevas variables hemos elegido, de esta forma, z que da cuenta del centro de masa del sistema, y x e y , que dan cuenta de las coordenadas relativas entre las variables. Podemos notar que este cambio de variable no es, por supuesto, el único cambio de variable posible para estudiar el sistema. Las coordenadas de Jacobi son muchas veces utilizadas para resolver sistemas similares [9, 14], pero sin embargo, dicho cambio de variables introduce condiciones de contorno dadas por el potencial que son complicadas de tratar utilizando el método variacional. Las coordenadas aquí propuestas convierten el problema en uno de condiciones de contorno de Dirichlet [18], y podemos tratar esta condición de frontera con una sencilla elección de la base de un subespacio de Hilbert del Hamiltoniano del sistema. Finalmente, las constantes que aparecen reescalando las nuevas variables están definidas de forma tal que la transformación sea unitaria, con el objetivo también de que al cambiar de variables aparezcan Hamiltonianos canónicos del oscilador armónico.

El término b^2 , al ser constante, introduce simplemente un cambio del cero en la energía del sistema y puede, por lo tanto, ser ignorado durante el resto del análisis.

La coordenada de centro de masa z se desacopla totalmente de las otras dos sin ninguna condición de contorno más que aquella que exige que la función de onda sea de cuadrado integrable.

Al igual que en el caso de dos partículas, el centro de masa se comporta como si estuviese en presencia de un potencial armónico, sin ninguna inhomogeneidad. La variable z puede tomar cualquier valor en el rango $(-\infty, \infty)$, con lo que la solución de (3.21) es la ya conocida del oscilador armónico

$$h_Z \phi_Z = \epsilon_Z \phi_Z, \quad (3.25)$$

$$\phi_Z = \phi_n(z) = C_n e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z), \quad (3.26)$$

$$\epsilon_Z = \epsilon_n = n + \frac{1}{2}. \quad (3.27)$$

El termino h_{XY} es el que presenta el mayor reto para su resolución, y es, por consiguiente, el de mayor interés en cuanto a la descripción del sistema. Estudiaremos este Hamiltoniano haciendo uso del método variacional de Rayleigh-Ritz. Por simplicidad, reescribimos (3.22) en terminos de los operadores escalera, u operadores creación y aniquilación, del oscilador armónico canónico [2]

$$\begin{aligned}\hat{a}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{a}_x^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{\partial}{\partial x} \right).\end{aligned}\tag{3.28}$$

Los operadores \hat{a}_y y \hat{a}_y^\dagger se definen de manera análoga. Recordemos la forma en la que estos operadores actúan sobre los autoestados ϕ_n del oscilador armónico

$$\begin{aligned}\hat{a}\phi_n &= \sqrt{n}\phi_{n-1}, \\ \hat{a}^\dagger\phi_n &= \sqrt{n+1}\phi_{n+1}.\end{aligned}\tag{3.29}$$

Definimos el operador número como

$$\hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x.\tag{3.30}$$

El mismo actúa sobre los autoestados ϕ_n de la forma

$$\hat{n}_x\phi_n(x) = n_x\phi_n(x).\tag{3.31}$$

Utilizando estos operadores, reescribimos (3.22)

$$h_{XY} = \frac{2}{\sqrt{3}}(\hat{n}_x + \hat{n}_y + 1) + \frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{a}_x\hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger) + \frac{4\sqrt{3}}{\sqrt{2}}b(\hat{a}_x + \hat{a}_y + \hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_y^\dagger).\tag{3.32}$$

El conjunto de soluciones impares del oscilador armónico es un conjunto completo de funciones ortogonales en el intervalo $[0, \infty)$, que cumplen la condición de contorno (3.24). Podemos, por lo tanto, tomarlas como la base variacional que utilizaremos para encontrar las soluciones del sistema descrito por (3.22).

De esta manera, el funcional que utilizaremos para el procedimiento variacional de Rayleigh-Ritz es

$$\phi_{X,Y} = \sum_{i,j=0}^M c_{ij}\varphi_{2i+1}(x)\varphi_{2j+1}(y),\tag{3.33}$$

donde la función φ_k de la base es la k -ésima autofunción del oscilador armónico canónico, normalizada en el intervalo $[0, \infty)$

$$\varphi_k(x) = |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{2^k k!} e^{-\frac{x^2}{2}} H_k(x). \quad (3.34)$$

En principio, de acuerdo al método variacional obtendremos los valores exactos de la energía si $M \rightarrow \infty$, pero computacionalmente es necesario truncar la base. La elección de M queda mejor justificada en las secciones siguientes. Notamos que si el polinomio de Hermite, asociado a la función de una partícula, más alto que tomamos es de orden k , nuestra base variacional tendrá tamaño $M = k^2$.

Podemos reescribir la función $\phi_{X,Y}$ como

$$\phi_{X,Y} = \sum_{i,j=0}^N c_{ij} |2i+1, 2j+1\rangle, \quad (3.35)$$

donde $|2i+1, 2j+1\rangle = |2i+1\rangle \otimes |2j+1\rangle$

Para realizar el cálculo variacional necesitaremos calcular los elementos de matriz $\langle 2i+1, 2j+1 | h_{XY} | 2m+1, 2n+1 \rangle$ y la matriz de *overlap* S . Debido a nuestra elección de base, la matriz de *overlap* resulta $S = \delta_{2i+1, 2m+1} \delta_{2j+1, 2n+1}$, o equivalentemente $S = \delta_{i,m} \delta_{j,n}$, debido a que en el intervalo $(0, \infty)$ las funciones tomadas como base variacional son ortogonales.

Para el cálculo de los elementos de matriz del Hamiltoniano h_{XY} utilizaremos por simplicidad el Hamiltoniano reescrito en términos de los operadores de creación y aniquilación. Así, el cálculo se reduce a el cálculo de integrales del tipo

$$\langle i, j | n, m \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty \varphi_i^*(x) \varphi_j^*(y) \varphi_n(x) \varphi_m(y) dx dy. \quad (3.36)$$

donde i, j, n y m son números naturales.

Basta simplemente calcular la integral para una de las variables, debido a que como las autofunciones corresponden a distintos espacios de Hilbert, la integral es separable. Así, calculamos analíticamente el valor de

$$\langle i | n \rangle = \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{2^{i+n} i! n!} e^{-x^2} H_i(x) H_n(x) dx, \quad (3.37)$$

donde obtenemos que la solución de la integral es

$$\langle i|n\rangle = \begin{cases} \delta_{i,n} & \text{si } i \text{ y } n \text{ son ambos pares o ambos impares} \\ \frac{1}{\sqrt{4\pi}2^{i+n}i!n!} I_{i,n} & \text{si } i \text{ es impar y } n \text{ par.} \end{cases} \quad (3.38)$$

donde

$$I_{i,n} = \begin{cases} \frac{2^i i! (n-1)!}{(n-i-1)!} H_{n-i-1}(0) & \text{si } n > i \\ \frac{2^n i! (n-1)!}{(i-n)!} H_{i-n}(0) & \text{si } n < i. \end{cases} \quad (3.39)$$

En el caso de n impar e i par, hacemos uso de $\langle i|n\rangle = \langle n|i\rangle^*$, y usamos el resultado (3.38). Utilizando este resultado, calculamos los elementos de matriz del Hamiltoniano y diagonalizamos la matriz resultante para encontrar las cotas de las energías. La derivación del resultado (3.38) se encuentra detallada en el Apéndice A.

3.2.1. Autovalores del sistema

Aplicando el método de Rayleigh-Ritz junto con el resultado (3.38), encontramos entonces los autovalores correspondientes al Hamiltoniano h_{XY} . Vale la pena notar que la energía del sistema estará dada por dicho autovalor, más la energía del centro de masa y la constante b^2

$$\epsilon = n + 1/2 + b^2 + \epsilon_{XY}. \quad (3.40)$$

Utilizando una base variacional compuesta por 30 polinomios de Hermite de una partícula, cuyo tamaño queda justificado en la sección siguiente, obtenemos los autovalores del estado fundamental y de los estados excitados, dependientes del diámetro b . Los mismos se encuentran graficados en la figura (3.2)

Varias cosas son notables de este espectro. En primer lugar, cuando $b \rightarrow 0$, las energías tienden a los valores $\epsilon_{XY} = 4, 6, 7, 8, \dots$. Estos valores fueron calculados analíticamente por D'Amico y Rontani [14], para el caso $b = 0$, utilizando un sistema de coordenadas relativas de Jacobi. El valor energético $\epsilon = 5$ se accede mediante excitaciones del centro de masa.

Otro aspecto de este espectro a notar son las degeneraciones que aparecen a partir del sexto autovalor para $b = 0$. Dichas degeneraciones se rompen cuando $b > 0$, y constituyen un resultado interesante, ya que dan cuenta de aquellos efectos, potencialmente

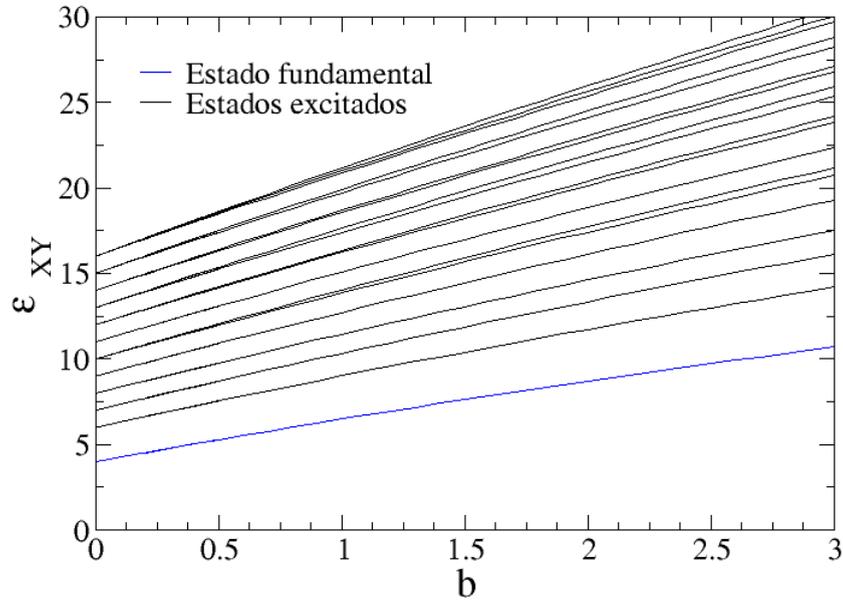


FIGURA 3.2: Autovalores del Hamiltoniano h_{XY} , dependientes del diámetro b , para una base variacional de tamaño $M = 30^2$

medibles experimentalmente, que tiene introducir el tamaño en la descripción de las partículas. Las degeneraciones son consecuencia de la simetría de espejo que presenta el sistema para $b = 0$, la cual se rompe cuando variamos el radio de las partículas. El trabajo mencionado de D'Amico y Rontani [14] ha sido realizado estrictamente a $b = 0$ e interacciones de tipo *soft core*. En el límite de repulsión fuerte, equivalente a un potencial de esferas rígidas, el sistema descrito por estos autores presenta las degeneraciones que nuestro sistema presenta para $b \rightarrow 0$.

3.2.2. Convergencia del método variacional

La elección del tamaño de la base no fue realizada de manera arbitraria. Recordamos que utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz encontramos los autovalores de forma exacta si tomamos una base completa de un espacio de Hilbert del sistema, en este caso, todos los polinomios de Hermite de orden impar. Sin embargo, no es posible realizar cálculos numéricos con bases infinitas: debemos truncar la base, y para ello, debemos realizar una elección en cuanto al tamaño de la misma.

En las figuras (3.3) - (3.5) se puede observar la convergencia de los primeros cinco autovalores del sistema h_{XY} en función de $\frac{1}{K}$, donde $M = K \times K$ denota el tamaño tomado de la base variacional, y $2K - 1$ indica el polinomio de Hermite de mayor orden

en dicha base. Numéricamente, la convergencia es rápida, y la elección de una base de 30 polinomios de Hermite nos permite asegurar un error relativo en el valor de las autoenergías menor al 0.005%. Cuanto más exacto deseemos que sea el cálculo, mayor debe ser la base. En las figuras también se encuentra realizado el mismo ajuste (3.17) que hicimos en el ejemplo de dos partículas. Hemos tomado $\gamma = 2$, y los coeficientes de correlación de los ajustes cumplen $r \geq 0.98$. El estado fundamental, y el ajuste realizado para extrapolar el valor del estado fundamental, se ve ampliado en la esquina izquierda superior de todas las figuras.

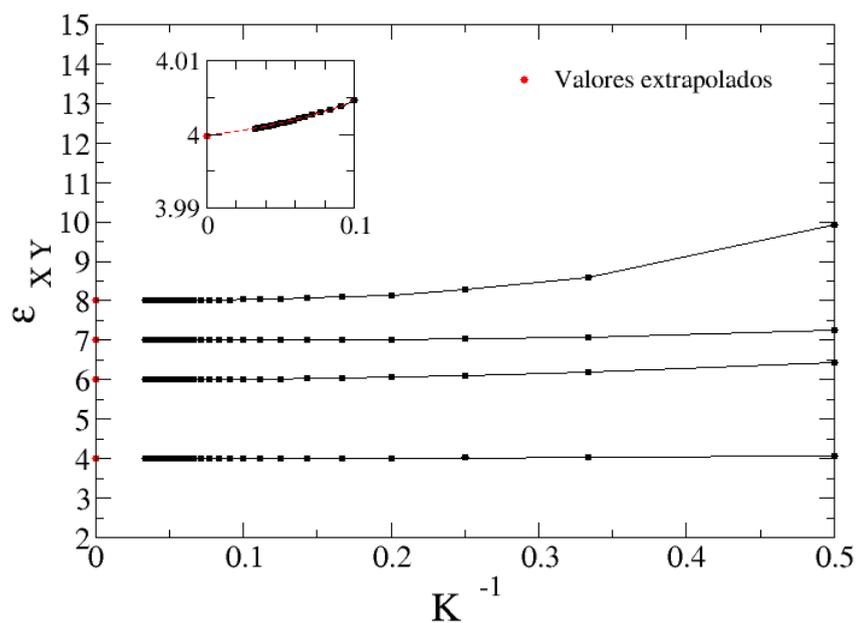


FIGURA 3.3: Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 0$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental,

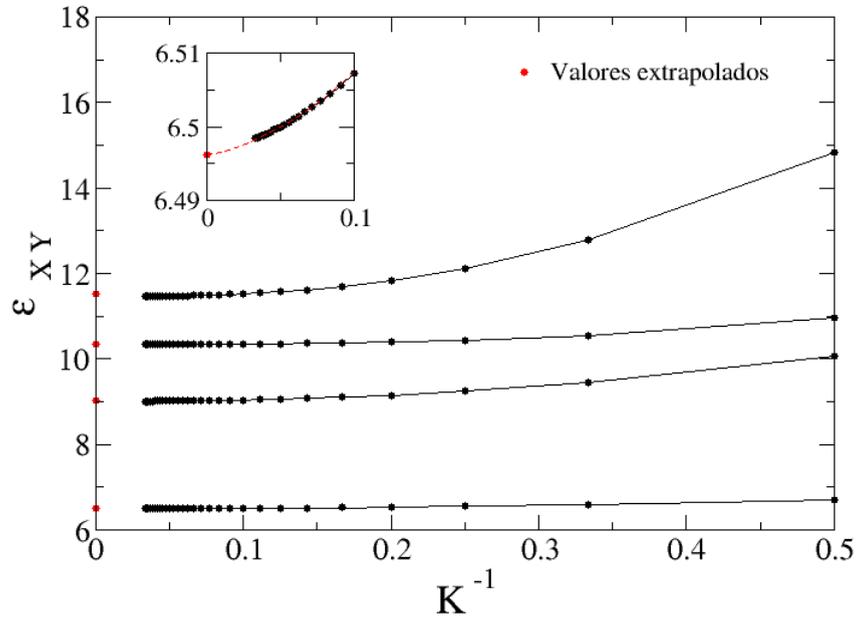


FIGURA 3.4: Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 1$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental,

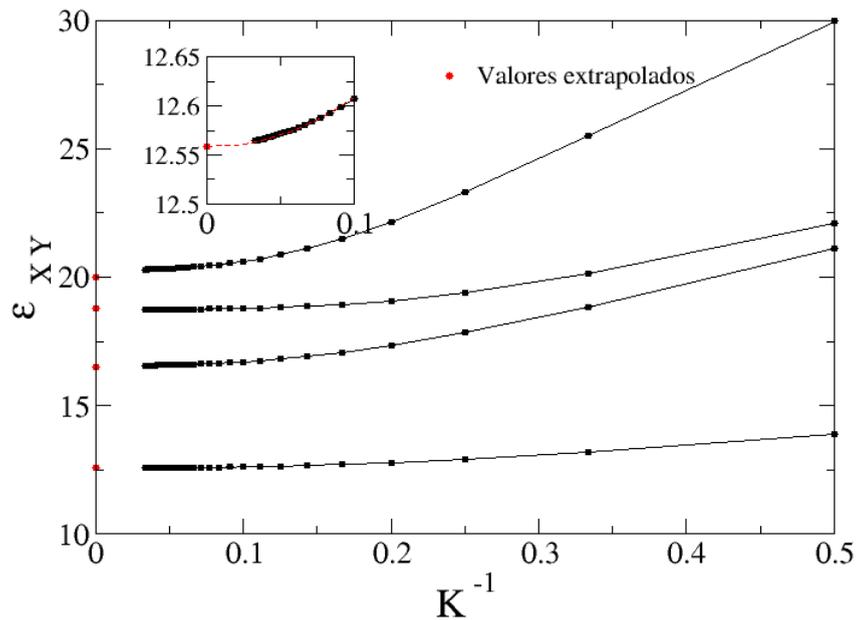


FIGURA 3.5: Convergencia de los autovalores del Hamiltoniano H_{XY} del problema de tres partículas para el caso $b = 4$. Ampliación de la convergencia de la cota de la energía del estado fundamental.

Podemos notar que cuanto mayor es el diámetro de las partículas, la convergencia es más lenta respecto al tamaño de la base, y el costo computacional es entonces mayor.

3.2.3. Densidad de probabilidad del sistema

En las figuras (3.6) y (3.7) podemos ver la densidad de probabilidad del estado fundamental del sistema, dependiente del parámetro b , el cual nos indica el diámetro de las partículas del sistema. La variable x indica ahora la variable espacial de la trampa armónica unidimensional en la cual se encuentran las partículas. La densidad de probabilidad de cada una de las partículas queda definida de la forma [2]

$$\begin{aligned}\rho_1(x) &= \int_{x+b}^{\infty} \left(\int_{x_2+b}^{\infty} |\Phi(x, x_2, x_3)|^2 dx_3 \right) dx_2 \\ \rho_2(x) &= \int_{-\infty}^{x-b} \left(\int_{x+b}^{\infty} |\Phi(x_1, x, x_3)|^2 dx_3 \right) dx_1 \\ \rho_3(x) &= \int_{-\infty}^{x-b} \left(\int_{-\infty}^{x_2-b} |\Phi(x_1, x_2, x)|^2 dx_1 \right) dx_2.\end{aligned}\tag{3.41}$$

Para encontrar las distribuciones de probabilidad que graficamos en (3.6) y (3.7) debimos integrar numéricamente las autofunciones obtenidas mediante el método de Rayleigh-Ritz utilizando el método de cuadraturas de Gauss-Hermite [23].

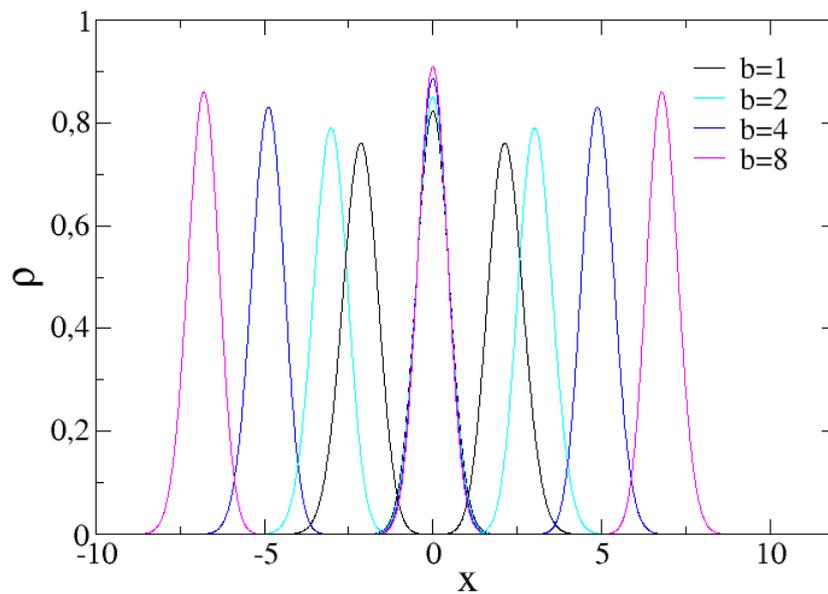


FIGURA 3.6: Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas y diámetros $b \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 30^2$

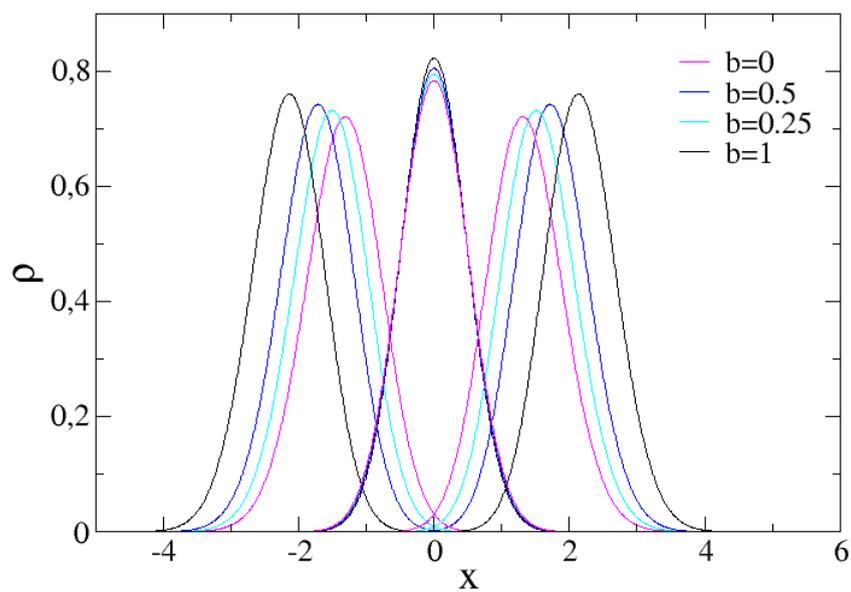


FIGURA 3.7: Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas y diámetros $b \leq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 30^2$

Vemos que cuando $b \rightarrow \infty$, la distribución de probabilidad tiende a colapsar y centrarse en los valores esperados clásicamente, esto es, el valor de expectación de cada una de las posiciones de las partículas, se acerca al valor del diámetro de las partículas cuanto más crece el mismo.

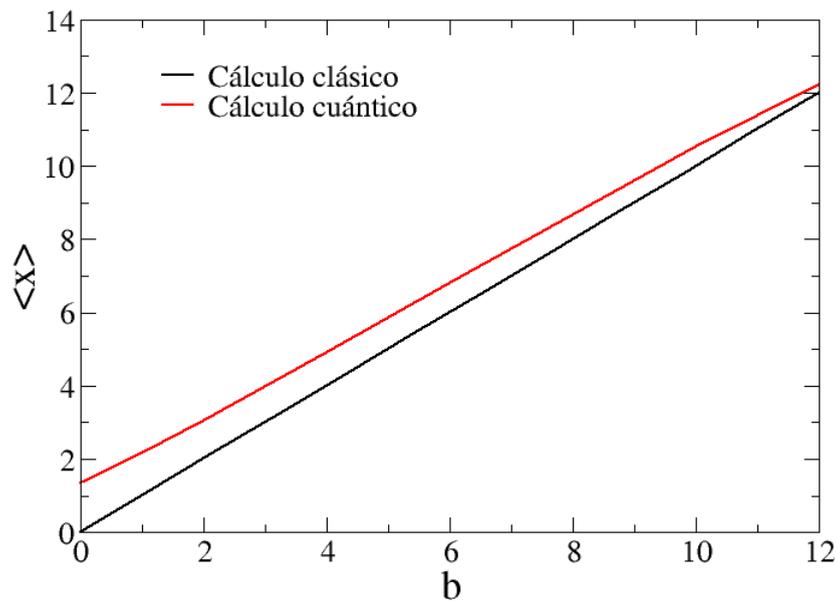


FIGURA 3.8: Comparación de los cálculos clásico (línea negra) y cuántico (línea roja) del valor de expectación de $x = x_3$, esto es, la posición de la partícula de un extremo.

3.3. Efectos de indistinguibilidad en el problema de tres partículas

Al igual que en el caso de dos partículas, al tener interacción de esferas rígidas entre las partículas, el espectro de energías no cambia cuando introducimos indistinguibilidad. Nuevamente, este resultado sólo es válido para interacciones de tipo esferas rígidas y no de *soft core*, en donde el cálculo debería ser modificado [14].

Capítulo 4

N esferas rígidas en un potencial armónico

En este capítulo buscamos generalizar la descripción del problema de pocas partículas atrapadas en un potencial armónico unidimensional a un gas de N partículas idénticas. Analizamos además la convergencia del método de Rayleigh-Ritz para sistemas con $N \geq 3$.

4.1. Generalización del Hamiltoniano del sistema

Estudiaremos ahora el Hamiltoniano de N partículas interactuando en el mismo potencial de contacto con el que trabajamos hasta ahora. El Hamiltoniano es entonces

$$H = \sum_{i=0}^N h_i + \sum_{i=1}^{N-1} w(|x_i - x_{i+1}|), \quad (4.1)$$
$$H\Psi(x_1, \dots, x_N) = E\Psi(x_1, \dots, x_N).$$

Nuevamente, h_i son los Hamiltonianos de una partícula en un potencial armónico, b es el diámetro de las partículas y el potencial de interacción w toma la forma

$$w(|x_{i+1} - x_i|) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_{i+1} - x_i \leq b \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (4.2)$$

Como las partículas son distinguibles, tomamos $x_1 < x_2 < \dots < x_N$, y el potencial de contacto entonces cumple

$$\sum_{i=1}^{N-1} w(|x_i - x_{i+1}|) = \sum_{i=1}^{N-1} w(x_{i+1} - x_i). \quad (4.3)$$

Al igual que en los casos de dos y tres partículas, buscamos reescribir este Hamiltoniano de forma tal que el potencial de interacción se transforme en una condición de contorno, lo cual simplifica la solución del problema mediante métodos variacionales. Para ello, el cambio de variable propuesto es:

$$y_1 = \sum_{i=1}^N x_i, \quad (4.4)$$

$$y_j = x_j - x_{j-1} - b \text{ para } j \geq 2.$$

Podemos expresar este cambio de variable en forma matricial

$$\vec{y} = \mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}, \quad (4.5)$$

donde

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix}, \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ b \\ \vdots \\ b \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

son las posiciones de las N partículas, \vec{y} son las nuevas coordenadas, donde y_1 es la coordenada relacionada con el centro de masa, aún no normalizada, y \vec{b} es el vector que da cuenta del radio de las partículas. en este caso, hemos tomado todas las partículas del mismo tamaño, pero podemos repetir el cálculo para cuando las partículas tienen distintos radios. \mathbf{A} es la matriz $N \times N$ de cambio de base

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Simplificamos el cambio de variables haciendo en primer lugar el reemplazo

$$\vec{y}' = \vec{y} + \vec{b}. \quad (4.8)$$

Para transformar el Hamiltoniano (4.1) podemos reescribirlo de forma vectorial, en términos de \vec{x} y del operador gradiente $\nabla_{\vec{x}} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_N} \right)$,

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_{\vec{x}} \cdot \nabla_{\vec{x}} + \frac{1}{2} \vec{x} \cdot \vec{x} + \sum_{i=1}^{N-1} w(x_{i+1} - x_i), \quad (4.9)$$

y usar las transformaciones

$$\begin{aligned} \vec{x} &= \mathbf{A}^{-1} \vec{y}', \\ \nabla_{\vec{x}} &= \mathbf{A}^{\top} \nabla_{\vec{y}'}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

donde las matrices \mathbf{A}^{-1} y \mathbf{A}^{\top} toman la forma explícita

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} 1 & -(N-1) & -(N-2) & -(N-3) & \dots & -1 \\ 1 & 1 & -(N-2) & -(N-3) & \dots & -1 \\ 1 & 1 & 2 & -(N-3) & \dots & -1 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 2 & 3 & \dots & N-1 \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{A}^{\top} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & -1 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Así, reescribimos

$$\begin{aligned} \vec{x} \cdot \vec{x} &= \frac{y_1'^2}{N} + \sum_{j=2}^N \frac{(N-j+1)(j-1)}{N} y_j'^2 + \sum_{k < j < 1}^N \frac{2(N-k+1)(j-1)}{N} y_k' y_j' \\ \nabla_{\vec{x}} \cdot \nabla_{\vec{x}} &= N \left(\frac{\partial}{\partial y_1'} \right)^2 + \sum_{j=2}^N 2 \left(\frac{\partial}{\partial y_j'} \right)^2 - \sum_{j=2}^{N-1} 2 \frac{\partial}{\partial y_j'} \frac{\partial}{\partial y_{j+1}'}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Con lo que el Hamiltoniano es

$$\begin{aligned}
 H &= -\frac{1}{2}\nabla_{\vec{x}} \cdot \nabla_{\vec{x}} + \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \vec{x} \\
 &= \frac{1}{2} \left[\frac{y_1'^2}{N} - N \left(\frac{\partial}{\partial y_1'} \right)^2 \right] + \sum_{j=2}^N \left[\frac{(N-j+1)(j-1)}{2N} y_j'^2 - \left(\frac{\partial}{\partial y_j'} \right)^2 \right] \\
 &\quad + \sum_{k>j>1}^N \frac{(N-k+1)(j-1)}{N} y_j' y_k' + \sum_{j=2}^{N-1} \frac{\partial}{\partial y_j'} \frac{\partial}{\partial y_{j+1}'}.
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Ahora, recordando el reemplazo (4.8), volvemos a considerar el radio tomando

$$\vec{y} = \vec{y}' - \vec{b}. \tag{4.15}$$

Utilizando este sistema coordenado, el Hamiltoniano resultante es

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \left[\frac{y_1^2}{N} - N \left(\frac{\partial}{\partial y_1} \right)^2 \right] + \sum_{j=2}^N \left[\frac{(N-j+1)(j-1)}{2N} (y_j^2 + 2y_j b + b^2) - \left(\frac{\partial}{\partial y_j} \right)^2 \right] \\
 &\quad + \sum_{k>j>1}^N \frac{(N-k+1)(j-1)}{N} (y_j y_k + y_j b + y_k b + b^2) + \sum_{j=2}^{N-1} \frac{\partial}{\partial y_j} \frac{\partial}{\partial y_{j+1}},
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

con la condición de contorno

$$\begin{aligned}
 \Psi(x_1, \dots, x_N) &= \Phi(y_1, \dots, y_N), \\
 \Phi(y_1, \dots, y_j = 0, \dots, y_N) &= 0 \text{ para todo } j.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Ahora, realizamos una última transformación para llevar la expresión del Hamiltoniano anterior a una expresión dependiente de los Hamiltonianos h_i canónicos del oscilador armónico. Para todo $j \neq 1$

$$y_j = \left(\frac{(N-j+1)(j-1)}{2N} \right)^{\frac{1}{4}} z_j, \tag{4.18}$$

y para el caso de centro de masa, $j = 1$,

$$y_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} z_1. \tag{4.19}$$

Con este reescalo de las coordenadas, el Hamiltoniano resultante es

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{1}{2} z_1^2 + \sum_{j=2}^N \left[\frac{2(N-j+1)(j-1)}{N} \right]^{\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z_j} \right)^2 + \frac{1}{2} z_j^2 \right] \\
 & + \sum_{k>j>1}^N \left[\frac{4(N-k+1)^3(j-1)^3}{N^2(k-1)(N-j+1)} \right]^{\frac{1}{4}} z_j z_k - bN \sum_{j=2}^N \left[\frac{(N-j+1)(j-1)}{2N} \right]^{\frac{3}{4}} z_j \\
 & + \sum_{j=2}^{N-1} \left[\frac{(N-j+1)(N-j)(j-1)j}{4N^2} \right]^{\frac{1}{4}} \frac{\partial}{\partial z_j} \frac{\partial}{\partial z_{j+1}} + \frac{N(1-N^2)}{24} b^2.
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

Considerar los efectos del radio introduce términos lineales en el Hamiltoniano, que cambian la posición y la fase de la función de onda [24].

Finalmente, resulta conveniente expresar el Hamiltoniano en término de los operadores aniquilación y creación, para así poder aplicar el método variacional sobre el sistema de N partículas al igual que en el caso de tres partículas

$$\begin{aligned}
 H = & \hat{n}_1 + \frac{1}{2} + \sum_{j=2}^N \left[\frac{2(N-j+1)(j-1)}{N} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\hat{n}_j + \frac{1}{2} \right] \\
 & + \sum_{k>j>1}^N \left(\frac{4(N-k+1)^3(j-1)^3}{N^2(k-1)(N-j+1)} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2} \left(\hat{a}_j \hat{a}_k + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \right) \\
 & + bN \sum_{j=2}^N \left[\frac{(N-j+1)(j-1)}{2N} \right]^{\frac{3}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \right) \\
 & + \sum_{j=2}^{N-1} \left[\frac{(N-j+1)(N-j)(j-1)j}{4N} \right]^{\frac{1}{4}} \frac{1}{2} \left(\hat{a}_j \hat{a}_{j+1} - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} - \hat{a}_j \hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1}^\dagger \right) \\
 & + \frac{N(1-N^2)}{24} b^2.
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

4.1.1. Sistema de 4 partículas

Particularizamos los resultados obtenidos para el caso $N=4$

4.1.1.1. Autovalores y convergencia

Si separamos del Hamiltoniano (4.21) el centro de masa, cuya energía y autovalores corresponden a un oscilador armónico canónico, y el término constante por un lado, y utilizamos el método de Rayleigh-Ritz para encontrar los autovalores ϵ de los términos restantes, la energía total del sistema estará dada por:

$$E = n + \frac{1}{2} + \frac{15b^2}{6} + \epsilon. \quad (4.22)$$

Utilizando una base variacional de 22 polinomios de Hermite, obtenemos los autovalores del estado fundamental, dependientes del parámetro b , lo que da una base variacional de $22^3 = 10648$ funciones. Los autovalores se encuentran graficados en la figura (4.1)

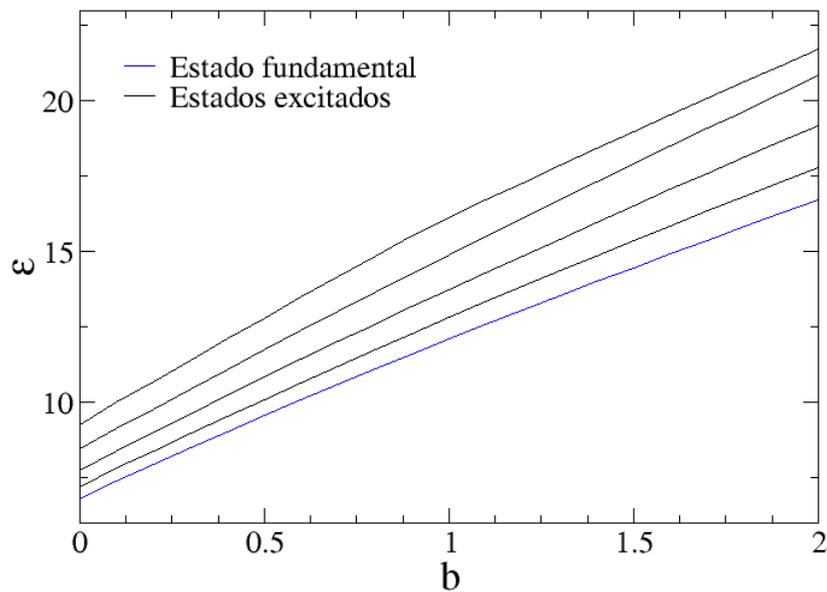


FIGURA 4.1: Primeros 5 autovalores ϵ del Hamiltoniano de coordenadas relativas de cuatro partículas, dependientes del diámetro b , con una base variacional de 22 polinomios de Hermite de una partícula, esto es, $M = 22^3$

La convergencia del método para encontrar la energía del estado fundamental se ve graficada en la figura (4.2), para el caso de $b = 0$. Puede observarse que el tamaño de la base variacional tomada no fue suficiente para que las cotas de los autovalores entren en un régimen asintótico, con lo cual no podemos realizar extrapolaciones de las autoenergías del sistema. Para esto, necesitaríamos de mayor poder computacional.

Esperamos ver degeneraciones de las energías a partir de un autovalor más alto que para el caso de tres partículas: para este caso encontrábamos degeneraciones desde el sexto autovalor, pero como aquí nos encontramos con una partícula más, las degeneraciones aparecerían en autovalores más altos. Sin embargo, debido a que el método de Rayleigh Ritz no tiene una buena convergencia para el problema de $N \geq 4$ partículas, y genera cotas cada vez menos exactas de la energía cuanto más alto es el autovalor, no hemos podido ver en este caso las degeneraciones esperadas.

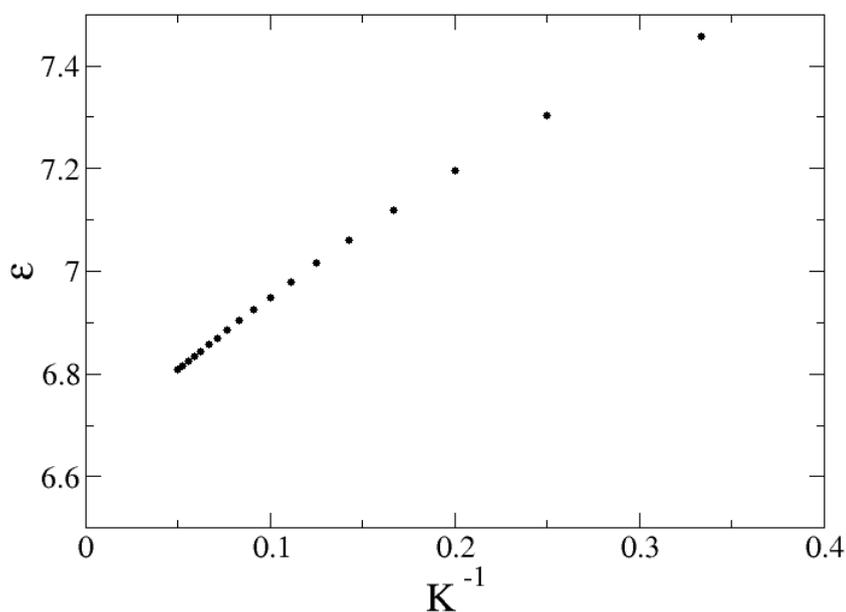


FIGURA 4.2: Convergencia de las cotas de la energía para el estado fundamental del Hamiltoniano de las coordenadas relativas de cuatro partículas, para el caso $b = 0$.

4.1.1.2. Densidad de probabilidad del sistema

En las figuras (4.3) y (4.4) podemos ver el estado fundamental del sistema, dependiente del parámetro b , que nos indica el diámetro de las partículas del sistema, para una base variacional de 22 polinomios de Hermite.

Definimos las densidades de probabilidad $\rho_i(x)$ de la misma forma que en (3.41)

$$\begin{aligned}
 \rho_1(x) &= \int_{x+b}^{\infty} \left(\int_{x_2+b}^{\infty} \left(\int_{x_3+b}^{\infty} |\Phi(x, x_2, x_3, x_4)|^2 dx_4 \right) dx_3 \right) dx_2 \\
 \rho_2(x) &= \int_{-\infty}^{x-b} \left(\int_{x+b}^{\infty} \left(\int_{x_3+b}^{\infty} |\Phi(x_1, x, x_3, x_4)|^2 dx_4 \right) dx_3 \right) dx_1 \\
 \rho_3(x) &= \int_{x+b}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{x-b} \left(\int_{-\infty}^{x_2-b} |\Phi(x_1, x_2, x, x_4)|^2 dx_1 \right) dx_2 \right) dx_4 \\
 \rho_4(x) &= \int_{-\infty}^{x-b} \left(\int_{-\infty}^{x_3-b} \left(\int_{-\infty}^{x_2-b} |\Phi(x_1, x_2, x_3, x)|^2 dx_1 \right) dx_2 \right) dx_3
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

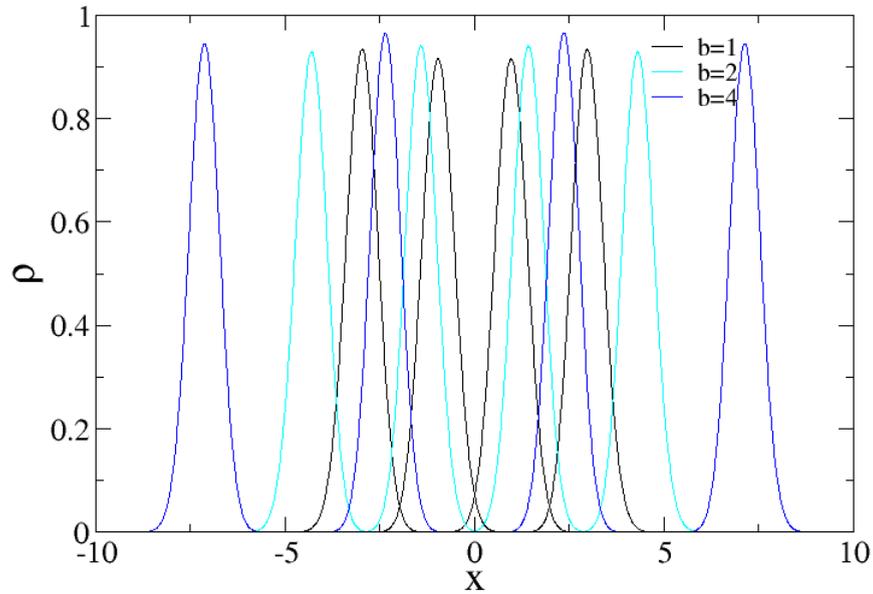


FIGURA 4.3: Densidad de probabilidad de sistemas con cuatro partículas y diámetros $b \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 22$ polinomios de una partícula, esto es $M = 22^3$

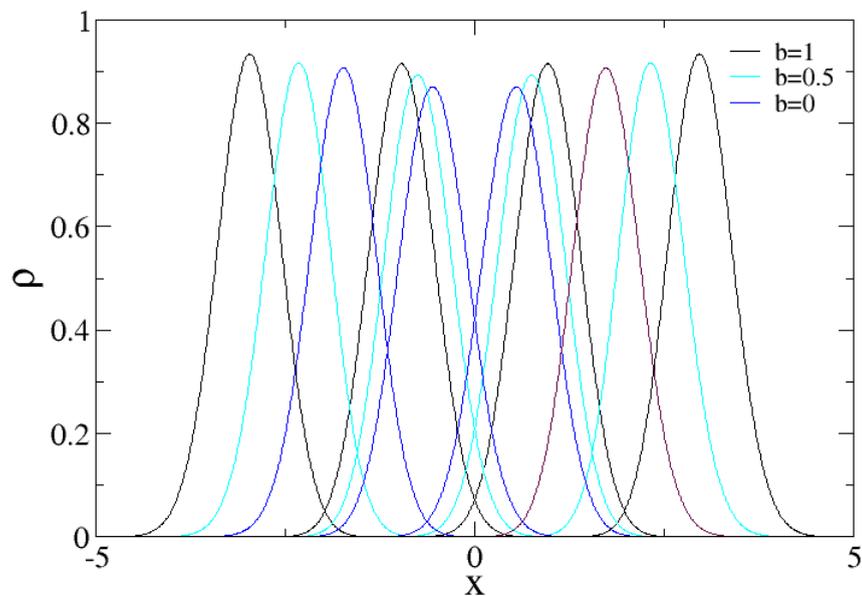


FIGURA 4.4: Densidad de probabilidad de sistemas con cuatro partículas y diámetros $b \leq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $M = 22^3$

Capítulo 5

Efectos de impurezas en sistemas de esferas rígidas en trampas armónicas

5.1. Impurezas en sistemas de dos partículas

Un sistema de dos partículas en un potencial armónico en el que las partículas no tienen ni el mismo tamaño ni la misma masa, puede modelarse con el Hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{1}{2} x_1^2 - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{d^2}{dx_2^2} + \frac{1}{2} m x_2^2 + w(x_2 - x_1), \quad (5.1)$$

y el potencial de esferas rígidas w dado por

$$w(x_1, x_2) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_2 - x_1 \leq \tilde{b} \\ 0 & \text{si } x_2 - x_1 > \tilde{b} \end{cases}, \quad (5.2)$$

en donde x_i indica la posición de la partícula i , con $i = 1, 2$, y $\tilde{b} = r_1 + r_2$ es la suma de los radios de ambas partículas. Tomamos, sin pérdida de generalidad, $x_2 > x_1$. Nuevamente tomamos un sistema de unidades donde $\hbar = 1$, $\omega = 1$ para ambas partículas y las masas de la partículas queda definida por $m_1 = 1$ y $m_2 = m$, o equivalentemente, mediante el reescalo de las variables $x_i \rightarrow \frac{x_i}{\sqrt{\frac{\hbar}{m_1 \omega}}}$. La energía queda definida entonces también mediante un reescalo $E \rightarrow \frac{E}{\hbar \omega}$.

Si realizamos el mismo análisis hecho en el capítulo 2, el Hamiltoniano con una impureza resulta soluble con un simple reescalo del cambio de variable (2.20) utilizado:

$$\begin{aligned} u &= \frac{x_1 + mx_2}{\sqrt{1+m}}, \\ v &= \frac{x_2 - x_1}{\sqrt{1+m}}. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Con este cambio de variable, el Hamiltoniano se convierte en

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} u^2 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dv^2} + \frac{1}{2} v^2, \tag{5.4}$$

y la condición de contorno en

$$w(v) = \begin{cases} \infty & \text{si } v \leq b \\ 0 & \text{si } v > b. \end{cases}, \tag{5.5}$$

donde ahora $b = \sqrt{\frac{m+1}{m}} \tilde{b}$. Con este cambio de variables, el Hamiltoniano y la condición de contorno resultan idénticas al problema de dos partículas planteado en el capítulo dos, y la solución estará dada por (2.23)

5.2. Impurezas en sistemas de tres partículas

Supongamos que tenemos un sistema de tres partículas, con dos de ellas idénticas entre sí, y una impureza, esto es, una partícula de distinta masa y tamaño, atrapadas en el mismo potencial armónico e interactuando mediante un potencial de esferas rígidas. Nuevamente tomamos un sistema de unidades donde $\hbar = 1$, $\omega = 1$ para todas las partículas y las masas de la partículas queda definida por $m_i = 1$, excepto la impureza, cuya masa queda definida por $m_j = m$.

5.2.1. Caso donde la impureza se encuentra en un extremo

En primer lugar, realizamos la descripción del sistema en el caso $x_1 < x_2 < x_3$, donde la partícula 3 es la impureza. Esto es, las partículas cuyas posiciones quedan definidas por x_1 y x_2 tienen masas que definimos en nuestro sistema de unidades como $m_1 = 1$ y $m_2 = 1$, y radio $r = b$, mientras que la partícula cuya posición está marcada por x_3 posee $m_3 = m$ y radio $r = d$. El Hamiltoniano del sistema es entonces

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{1}{2} x_1^2 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_2^2} + \frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{d^2}{dx_3^2} + \frac{1}{2} m x_3^2 + w(x_1, x_2, x_3), \quad (5.6)$$

donde

$$w(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_2 - x_1 \leq b \\ \infty & \text{si } x_3 - x_2 \leq R = \frac{b+d}{2} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (5.7)$$

Realizamos el cambio de variable

$$\begin{aligned} x &= \frac{x_2 - x_1 - b}{\sqrt[4]{2+m}}, \\ y &= \frac{x_3 - x_2 - R}{\sqrt[4]{2+m}}, \\ z &= \frac{x_1 + x_2 + m x_3}{\sqrt{2+m}}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde vemos que si tomamos $m = 1$ recuperamos el caso (3.20). Con estas variables, el Hamiltoniano ahora resulta

$$H = H_Z + H_X + H_Y + H_{XY} + C. \quad (5.9)$$

con

$$\begin{aligned} H_Z &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} z^2, \\ H_X &= -\frac{1}{\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1+m}{2\sqrt{2+m}} x^2 + \frac{b+m(b+R)}{(2+m)^{\frac{3}{4}}} x, \\ H_Y &= -\frac{1+m}{2m\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m}{\sqrt{2+m}} y^2 + \frac{m(b+2R)}{(2+m)^{\frac{3}{4}}} y, \\ H_{XY} &= \frac{1}{\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dxdy} + \frac{m}{\sqrt{2+m}} xy, \\ C &= \frac{(1+m)b^2 + 2mR(b+R)}{2(2+m)}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Buscamos las soluciones de

$$H\Psi = E\Psi, \quad (5.11)$$

donde planteamos la solución a variables separadas

$$\begin{aligned} \Psi &= \psi_{X,Y}\psi_Z, \\ H_Z\psi_Z &= \epsilon_Z\psi_Z, \\ H_{XY}\psi_{XY} &= \epsilon_{XY}\psi_{XY}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

La energía E queda entonces definida por $E = \epsilon_X + \epsilon_{XY} + C$.

El Hamiltoniano H_Z correspondiente a la coordenada de centro de masa se corresponde al un oscilador armónico canónico (2.1) cuyas soluciones son las ya conocidas (2.2), con lo que

$$\begin{aligned} \psi_Z &= C_n e^{-z^2/2} H_n(z), \\ \epsilon_Z &= n_Z + \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

donde $C_n = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$.

Al igual que en el caso de tres partículas idénticas, el reto está en resolver H_{XY} . Definimos entonces las variables

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \left(\frac{1+m}{2}\right)^{\frac{1}{4}} x, \\ \tilde{y} &= \left(\frac{2m^2}{1+m}\right)^{\frac{1}{4}} y, \end{aligned} \quad (5.14)$$

que nos permiten reescribir los Hamiltonianos H_X y H_Y en términos de los Hamiltonianos canónicos de un oscilador armónico

$$\begin{aligned} H_X &= \sqrt{\frac{2(1+m)}{2+m}} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} \tilde{x}^2 \right) + \frac{b+m(b+R)2^{\frac{1}{4}}}{(2+m)^{\frac{3}{4}}(1+m)^{\frac{1}{4}}} \tilde{x}, \\ H_Y &= \sqrt{\frac{2(1+m)}{2+m}} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} + \frac{1}{2} \tilde{y}^2 \right) + \frac{m(b+2R)(1+m)^{\frac{1}{4}}}{(2+m)^{\frac{3}{4}}2^{1/4}(1+m)^{\frac{1}{4}}} \tilde{y}, \\ H_{XY} &= \sqrt{\frac{m}{2+m}} \left(\frac{d^2}{d\tilde{x}d\tilde{y}} + \tilde{x}\tilde{y} \right), \end{aligned} \quad (5.15)$$

Al igual que en el caso de 3 partículas, reescribimos este Hamiltoniano en términos de los operadores creación, aniquilación y el operador número, lo cual simplifica el cálculo de los elementos de matriz de H

$$\begin{aligned}
 H_X &= \sqrt{\frac{2(1+m)}{2+m}} \left(n_{\bar{x}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{b+m(b+R)}{(2+m)^{\frac{3}{4}}(2+2m)^{\frac{1}{4}}} (a_{\bar{x}} + a_{\bar{x}}^\dagger), \\
 H_Y &= \sqrt{\frac{2(1+m)}{2+m}} \left(n_{\bar{y}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{m(b+2R)(1+m)^{\frac{1}{4}}}{(2+m)^{\frac{3}{4}}2^{3/4}m^{1/2}} (a_{\bar{y}} + a_{\bar{y}}^\dagger), \\
 H_{XY} &= \sqrt{\frac{m}{2+m}} (a_{\bar{x}}a_{\bar{y}} + a_{\bar{x}}^\dagger a_{\bar{y}}^\dagger),
 \end{aligned} \tag{5.16}$$

5.2.1.1. Autovalores

Utilizando el método de Rayleigh-Ritz, calculamos los autovalores del sistema. Los autovalores más bajos del mismo se encuentran graficados en la figura (5.1)

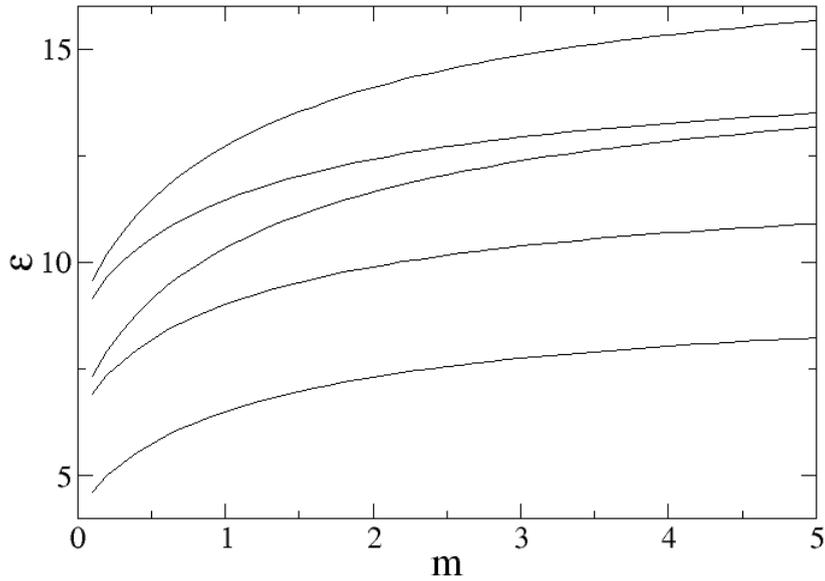


FIGURA 5.1: Autovalores más bajos del sistema con una impureza en un extremo, con $a = d = 1$ y una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.

Vemos que cuando $m \rightarrow 0$ los autovalores del sistema tienden a degenerarse. Esto se debe a que el caso $m = 0$ se corresponde al caso de dos partículas. Una tercera partícula introduce nuevos grados de libertad, y separa las líneas del espectro energético.

El caso $m \rightarrow \infty$ se corresponde a una pared de potencial impenetrable en $x = 0$. En este caso, existe una degeneración de las energías que resulta de que tanto los estados pares como impares poseen un nodo en $x = 0$ en este límite, y tienen, por lo tanto, la misma energía asociada.

5.2.1.2. Densidad de probabilidad del sistema

En las figuras (5.2) y (5.3) podemos ver la densidad de probabilidad del estado fundamental del sistema, dependientes de la masa m , que nos indica la masa de la partícula de un extremo del sistema, para una base variacional de 30 polinomios de Hermite de una partícula. Definimos $\rho(x)$ de la misma manera que en 3.41

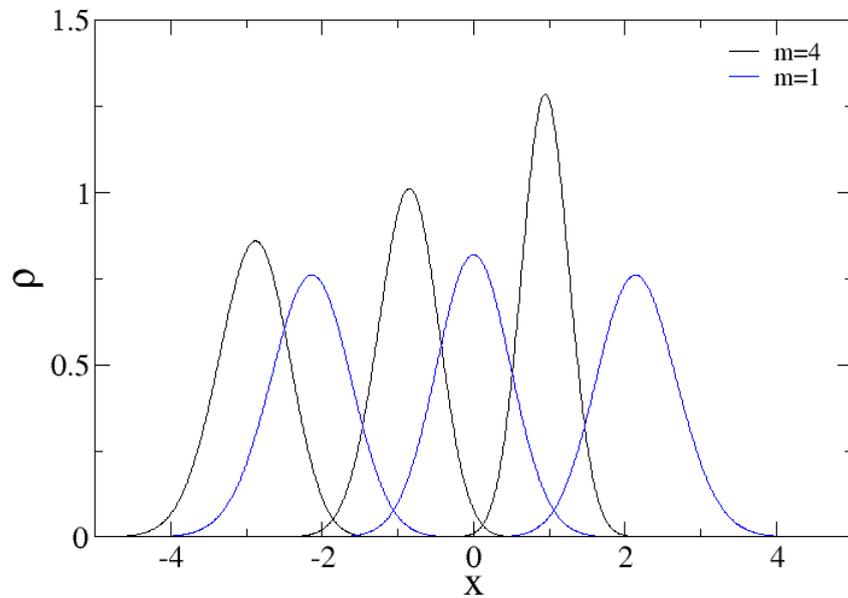


FIGURA 5.2: Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas, con una impureza de masa $m \geq 1$ en un extremo, y diámetros $b = d \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.

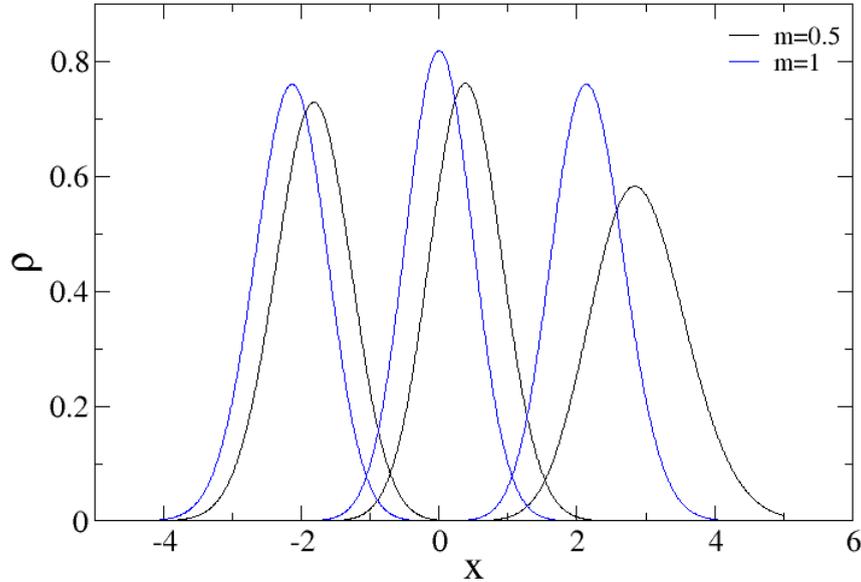


FIGURA 5.3: Densidad de probabilidad de sistemas con tres partículas, con una impureza de masa $m \leq 1$ en un extremo, y diámetros $b = d \geq 1$ en función de la variable espacial x , para una base variacional de $K = 30$ polinomios de Hermite de una partícula.

Podemos ver en la figura (5.2) que si la masa de la impureza es $m \geq 1$, entonces la misma se encuentra más localizada, y tiende a formar una pared de potencial en $x = 0$. En la figura (5.3) podemos ver que si la masa de la impureza es $m \leq 1$, la misma tiende a deslocalizarse.

5.2.2. Caso donde la impureza se encuentra en el medio

Ahora, realizamos la descripción del sistema en el caso $x_1 < x_2 < x_3$, donde la partícula 2 es la impureza. Esto es, las partículas cuyas posiciones quedan definidas por x_1 y x_3 tienen masas que definimos en nuestro sistema de unidades como $m_1 = 1$ y $m_3 = 1$, y radio $r = b$, mientras que la partícula cuya posición está marcada por x_2 posee $m_2 = m$ y radio $r = d$. El Hamiltoniano del sistema es entonces

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_1^2} + \frac{1}{2} x_1^2 - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_2^2} + \frac{1}{2} x_2^2 - \frac{1}{2} \frac{1}{m} \frac{d^2}{dx_3^2} + \frac{1}{2} m x_3^2 + w(x_1, x_2, x_3), \quad (5.17)$$

donde

$$w(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} \infty & \text{si } x_2 - x_1 \leq R = \frac{b+d}{2} \\ \infty & \text{si } x_3 - x_2 \leq R = \frac{b+d}{2} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (5.18)$$

Realizamos el cambio de variable

$$\begin{aligned} x &= \frac{x_2 - x_1 - R}{\sqrt[4]{2+m}}, \\ y &= \frac{x_3 - x_2 - R}{\sqrt[4]{2+m}}, \\ z &= \frac{x_1 + mx_2 + x_3}{\sqrt{2+m}}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

y obtenemos, de la misma manera que en la sección 5.2.1,

$$\begin{aligned} H_Z &= -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} z^2, \\ H_X &= -\frac{1+m}{2m\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1+m}{2\sqrt{2+m}} x^2 + (2+m)^{\frac{1}{4}} Rx, \\ H_Y &= -\frac{1+m}{2m\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1+m}{2\sqrt{2+m}} y^2 + (2+m)^{\frac{1}{4}} Ry, \\ H_{XY} &= \frac{1}{m\sqrt{2+m}} \frac{d^2}{dxdy} + \frac{1}{\sqrt{2+m}} xy, \\ C &= R^2. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Hacemos el cambio

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \sqrt[4]{m} x, \\ \tilde{y} &= \sqrt[4]{m} y, \end{aligned} \quad (5.21)$$

obtenemos los Hamiltonianos H_X y H_Y en términos de los Hamiltonianos canónicos de un oscilador armónico

$$\begin{aligned} H_X &= \frac{1+m}{\sqrt{2+m}} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} \tilde{x}^2 \right) + \left(\frac{2+m}{m} \right)^{\frac{1}{4}} R\tilde{x}, \\ H_Y &= \frac{1+m}{\sqrt{2+m}} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} + \frac{1}{2} \tilde{y}^2 \right) + \left(\frac{2+m}{m} \right)^{\frac{1}{4}} R\tilde{y}, \\ H_{XY} &= \frac{1}{\sqrt{(2+m)m}} \left(\frac{d^2}{d\tilde{x}d\tilde{y}} + \tilde{x}\tilde{y} \right), \end{aligned} \quad (5.22)$$

Finalmente, escribimos este Hamiltoniano en términos de los operadores creación y aniquilación

$$\begin{aligned}
 H_X &= \frac{1+m}{\sqrt{2+m}} \left(n_{\bar{x}} + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{2+m}{4m} \right)^{\frac{1}{4}} R(a_{\bar{x}} + a_{\bar{x}}^\dagger), \\
 H_Y &= -\frac{1}{2} \frac{1+m}{\sqrt{2+m}} \left(n_{\bar{y}} + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{2+m}{2m} \right)^{\frac{1}{4}} R(a_{\bar{y}} + a_{\bar{y}}^\dagger), \\
 H_{XY} &= \frac{1}{\sqrt{(2+m)m}} \left(a_{\bar{x}} a_{\bar{y}} + a_{\bar{x}}^\dagger a_{\bar{y}}^\dagger \right),
 \end{aligned} \tag{5.23}$$

Este sistema de coordenadas tiene el principal problema de ser una muy mala descripción de sistemas con masas $m \ll 1$. De hecho, computacionalmente nos encontramos con problemas cuando $m \sim 0.3$. Esto se debe a que los elementos de matriz del Hamiltoniano divergen cuando $m \rightarrow 0$. Sin embargo, podemos obtener algunos resultados para $m \geq 1$

5.2.2.1. Autovalores del sistema

Utilizando el método de Rayleigh-Ritz, calculamos los autovalores del sistema. Los autovalores más bajos del mismo se encuentran graficados en la figura. (5.4)

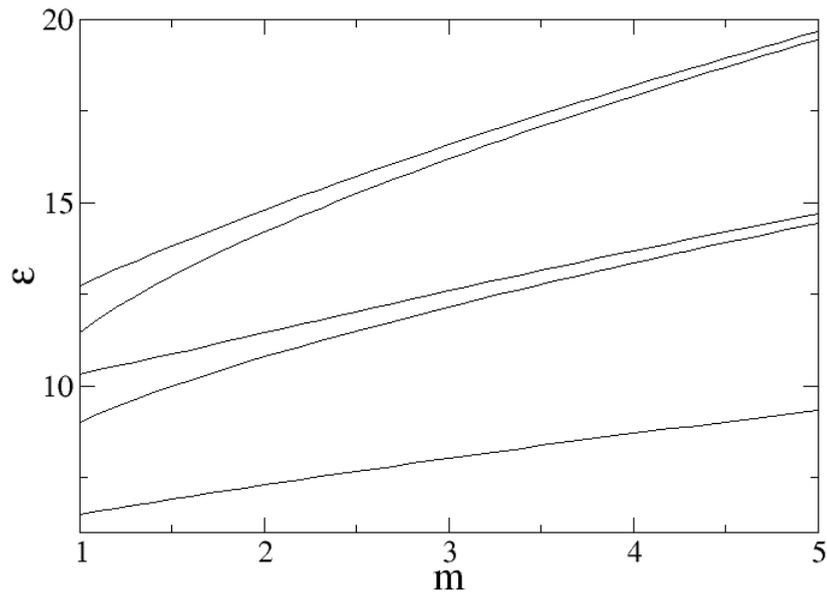


FIGURA 5.4: Autovalores más bajos del sistema con una impureza en el medio, con $b = d = 1$ y una base variacional de 30 polinomios de Hermite de una partícula.

El caso $m \rightarrow \infty$ se corresponde, al igual que en el caso anterior, a una pared de potencial impenetrable en $x = 0$. En este caso, existe una degeneración de las energías que resulta del nodo en la función de onda que genera dicha pared. En este caso, tanto los estados pares como impares de las partículas a cada lado de la barrera impenetrable poseen un nodo en $x = 0$, y tienen, por lo tanto, la misma energía asociada.

Capítulo 6

Conclusiones y Perspectivas

Durante el trabajo, hemos estudiado sistemas de pocas partículas atrapadas en trampas armónicas, interactuando mediante un potencial de contacto de esferas rígidas. En primer lugar, hemos realizado una descripción detallada y ordenada, en términos de las funciones de Hermite, de las soluciones del sistema de dos partículas, el cual es soluble exactamente. Hemos determinado también que la indistinguibilidad de las partículas no genera cambios en el espectro de energías del sistema, debido a la condición de esferas rígidas y a la correspondencia de fermiones con bosones en este caso, válida solo en una dimensión.

En segundo lugar, estudiamos sistemas de tres partículas atrapadas en un potencial armónico. Para el estudio del sistema de tres partículas hemos utilizado el método variacional de Rayleigh-Ritz. El mismo nos permitió encontrar los autovalores del sistema con un alto grado de precisión, y mediante cuadraturas gaussianas, pudimos integrar las funciones de onda obtenidas para graficar la densidad de partículas asociada. El espectro de energías del Hamiltoniano de las coordenadas relativas del problema de tres partículas exhibe degeneraciones para radios nulos, que se rompen al introducir a la descripción un parámetro que de cuenta del tamaño finito de las partículas. Este resultado es potencialmente medible experimentalmente, en cuyo caso resultaría de utilidad si se busca manipular sistemas reales de pocas partículas confinadas en una trampa.

Extendimos además la descripción del sistema a un gas de N partículas atrapadas en un potencial armónico. Debido a la capacidad de cálculo de las computadoras disponibles, el método de Rayleigh-Ritz que utilizamos para encontrar los autovalores del sistema no entró en un régimen asintótico, y por lo tanto, no pudimos estimar de forma precisa los autovalores del sistema para $N \geq 4$. Esto se debe principalmente a que el método propuesto presenta un crecimiento exponencial de la base variacional con el

número de partículas, y las matrices a diagonalizar son en consecuencia exponencialmente más grandes. Finalmente, analizamos los efectos que una impureza tiene en sistemas de dos y tres partículas.

Una posible perspectiva del trabajo presente, entre otras, es la de completar esta descripción y realizar simulaciones numéricas para impurezas en gases atrapados en trampas armónicas unidimensionales. Para ello será necesario contar con mayor poder computacional, ya que las matrices que debemos diagonalizar son demasiado grandes para poder almacenar en las computadoras con las que contamos actualmente.

Existen muchos aspectos de estos sistemas que restan estudiar, y que constituyen un gran conjunto de perspectivas futuras como continuación del presente trabajo. En primer lugar, las partículas han sido planteadas sin spin. El efecto de introducir el spin para un estudio más detallado del sistema constituye un posible camino futuro para la continuación de este trabajo. En segundo lugar, para poder estudiar sistemas de 4 o más partículas deberán buscarse algoritmos que nos permitan encontrar cotas para los autovalores que converjan más rápido respecto del tamaño de la base, o que nos permitan reducir el tamaño de la matriz a diagonalizar, ya que con el método utilizado el tamaño de la base variacional utilizada crece exponencialmente con el número de partículas.

Otras perspectivas para continuación del trabajo incluyen extender el formalismo de impurezas para gases de N partículas, buscar sistemas coordinados que nos permitan una buena descripción de sistemas con impurezas de masas pequeñas y finalmente analizar los efectos de variar simultáneamente el radio y la masa de las impurezas.

Por último, pueden incluirse anarmonicidades de la trampa en la descripción de los sistemas. Todos estos posibles caminos de estudio tienen como principal objetivo una descripción más detallada de problema, para eventualmente poder trasladar estos modelos a sistemas experimentales.

Apéndice A

Integrales de polinomios de Hermite

Durante el trabajo utilizamos el resultado de la integral

$$\langle i|n\rangle = \int_0^\infty e^{-x^2} H_i(x) H_n(x) dx, \quad (\text{A.1})$$

para el cálculo de los elementos de matriz de los Hamiltonianos, para poder utilizar el método de Rayleigh-Ritz. En este Apéndice derivamos el resultado de dicha integral. Para ello usamos las siguientes relaciones de recurrencia que cumplen los polinomios de Hermite [18]:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x), \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H_n(x) = 2xH_{n-1}(x), \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} H_n(x) = 2xH_n(x) - H_{n+1}(x), \quad (\text{A.4})$$

y los resultados ya conocidos [18]

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2(x) dx = 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad (\text{A.5})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = 0 \quad \text{si } m \neq n, \quad (\text{A.6})$$

$$H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!}, \quad (\text{A.7})$$

$$H_{2n+1}(0) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Además, utilizaremos la siguiente notación

$$\frac{\partial}{\partial x} H_n(x) = H'_n(x). \quad (\text{A.9})$$

e

$$I_{i,n} = \int_0^{\infty} e^{-x^2} H_i(x) H_n(x) dx. \quad (\text{A.10})$$

Lo primero que notamos es que, si n y m son números naturales, entonces

$$\begin{aligned} I_{n,n} &= \int_0^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_n(x) dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_n(x) dx \\ &= 2^{n-1} n! \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Esto se debe a la paridad de los polinomios de Hermite, si n es par, entonces $H_n(x) = H_n(-x)$, y si n es impar, entonces $H_n(x) = -H_n(-x)$, lo cual genera que $H_n^2(x)e^{-x^2}$ sea una función par. La integral de toda función par en el intervalo $(-\infty, \infty)$ es siempre el doble que la integral de dicha función en el intervalo $(0, \infty)$. Debido a esta propiedad de paridad de los polinomios, también se cumple que

$$I_{2n,2m} = 0 \quad \text{si } n \neq m \quad (\text{A.12})$$

e

$$I_{2n+1,2m+1} = 0 \quad \text{si } n \neq m. \quad (\text{A.13})$$

Así, la única integral de no trivial resulta $I_{2n,2m+1}$. Vamos a integrar por partes para encontrar una relación de recurrencia que nos ayude a conocer el valor de la integral $\forall n, m$. Para ello, usamos las relaciones (A.2) - (A.4).

$$\begin{aligned}
 I_{2n,2m+1} &= \int_0^\infty e^{-x^2} H_{2n}(x) H_{2m+1}(x) dx \\
 &= e^{-x^2} \frac{H_{2n+1}(x)}{2(2n+1)} H_{2m+1}(x) \Big|_0^\infty - \int_0^\infty \frac{H_{2n+1}(x)}{2(2n+1)} \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{-x^2} H_{2m+1}(x) \right) \\
 &= - \int_0^\infty e^{-x^2} \frac{H_{2n+1}(x)}{2(2n+1)} \left(H'_{2m+1}(x) - 2x H_{2m+1}(x) \right) \\
 &= \int_0^\infty e^{-x^2} \frac{H_{2n+1}(x)}{2(2n+1)} H_{2m+2}(x) \\
 &= \frac{1}{2(2n+1)} I_{2n+1,2m+2}.
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

Así, tenemos una relación de recurrencia para la integral

$$I_{2n+1,2m+2} = 2(2n+1) I_{2n,2m+1} \tag{A.15}$$

Supongamos en primer lugar que $2n+1 > 2m+2$. En ese caso, la relación (A.15) nos lleva a

$$I_{2n+1,2m+2} = \frac{2^{2n+1} (2n+1)!! (2m+1)!!}{(2m-2n)!!} I_{0,2m-2n+1}, \tag{A.16}$$

y en el caso $2m+2 > 2n+1$ obtenemos

$$I_{2n+1,2m+2} = \frac{2^{2m+2} (2n+1)!! (2m+1)!!}{(2n-2m-1)!!} I_{0,2n-2m-1}. \tag{A.17}$$

Las integrales que debemos calcular ahora son de la forma $I_{0,2k+1}$. Veamos esto

$$\begin{aligned}
 I_{0,2k+1} &= \int_0^{\infty} e^{-x^2} H_{2k+1}(x) dx \\
 &= e^{-x^2} \frac{H_{2k+2}(x)}{2(2k+2)} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-x^2} 2x \frac{H_{2k+1}(x)}{2(2k+1)} \\
 &= -\frac{H_{2k+2}(0)}{2(2k+2)} + \frac{1}{2(2k+2)} \int_0^{\infty} e^{-x^2} \left(2(2k+2)H_{2k+1}(x) + H_{2k+3}(x) \right) \\
 &= -\frac{H_{2k+2}(0)}{2(2k+2)} + \frac{1}{2(2k+2)} I_{0,2k+3} + I_{0,2k+1}.
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

Así, obtenemos que

$$I_{0,2k+3} = H_{2k+2}(0), \tag{A.19}$$

o lo que es equivalente

$$I_{0,2k+1} = H_{2k}(0) = (-1)^k \frac{(2k)!}{k!}. \tag{A.20}$$

Podemos entonces escribir el resultado de (A.14) de la siguiente manera

$$I_{2n+1,2m+2} = \begin{cases} \frac{2^{2n+1}(2n+1)!!(2m+1)!!}{(2m-2n)!!} H_{2m-2n}(0) & \text{si } 2m+2 > 2n+1 \\ \frac{2^{2m+2}(2n+1)!!(2m+1)!!}{(2n-2m-1)!!} H_{0,2n-2m-2}(0) & \text{si } 2m+2 < 2n+1, \end{cases} \tag{A.21}$$

de manera que el valor de la integral es

$$I_{2n+1,2m+2} = \begin{cases} \frac{2^{2n+1}(2n+1)!!(2m+1)!!}{(2m-2n)!!} (-1)^{2(m-n)} \frac{(4(m-n))!}{2^{(m-n)}!} & \text{si } 2m+2 > 2n+1 \\ \frac{2^{2m+2}(2n+1)!!(2m+1)!!}{(2n-2m-1)!!} (-1)^{2(n-m-1)} \frac{(4(n-m-1))!}{(n-m-1)!} & \text{si } 2m+2 < 2n+1. \end{cases} \tag{A.22}$$

Bibliografía

- [1] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*. Wiley, 3rd. ed., (1998).
- [2] N. Zettili, *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. Wiley, (2009).
- [3] L. Landau and E. Lifshitz, *Mechanics*. No. 1, Elsevier Science, (1982).
- [4] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*. HRW international editions, Holt, Rinehart and Winston, (1976).
- [5] M. Peskin and D. Schroeder, *An Introduction To Quantum Field Theory*. Frontiers in Physics, Avalon Publishing, (1995).
- [6] M. Moshinsky and Y. Smirnov, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics*. Contemporary concepts in physics, Harwood Academic Publishers, (1996).
- [7] N. F. Johnson, “Quantum dots: few-body, low-dimensional systems,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 7, no. 6, (1995).
- [8] P. Michler, *Quantum Dots for Quantum Information Technologies*. Nano-Optics and Nanophotonics, Springer International Publishing, (2017).
- [9] H. H. X.J. Liu and P. D. Drummond, “Three attractively interacting fermions in a harmonic trap: Exact solution, ferromagnetism and high temperature thermodynamics,” *Physics Review A*, vol. 82, no. 023619, (2010).
- [10] H. H. X.J. Liu and P. D. Drummond, “Virial expansion for a strongly correlated fermi gas,” *Physics Review Letters*, vol. 102, no. 160401, (2009).
- [11] H. H. X.J. Liu and P. D. Drummond, “Exact few-body results for strongly correlated quantum gases in two dimensions,” *Physics Review B*, vol. 82, no. 054524, (2010).
- [12] A. N. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe, and S. Jochim, “From few to many: Observing the formation of a fermi sea one atom at a time,” *Science*, vol. 342, no. 6157, (2013).

-
- [13] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. B. Ottenstein, A. N. Wenz, and S. Jochim, “Deterministic preparation of a tunable few-fermion system,” *Science*, vol. 332, no. 6027, (2011).
- [14] P. D’Amico and M. Rontani, “Three interacting atoms in a one-dimensional trap: a benchmark system for computational approaches,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 47, no. 6, (2014).
- [15] J. Viana-Gomes and N. M. R. Peres, “Solution of the quantum harmonic oscillator plus a delta-function potential at the origin: the oddness of its even-parity solutions,” *European Journal of Physics*, vol. 32, no. 5, (2011).
- [16] A. Elbert and M. E. Muldoon, “Inequalities and monotonicity properties for zeros of hermite functions,” *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh: Section A Mathematics*, vol. 129, no. 1, (1999).
- [17] A. Elbert and M. E. Muldoon, “Approximations for zeros of hermite functions,” *Contemporary Mathematics*, no. 471, (2008).
- [18] G. Arfken, H. Weber, and F. Harris, *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide*. YBP Print DDA, Elsevier, (2013).
- [19] M. Girardeau, “Relationship between systems of impenetrable bosons and fermions in one dimension,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 1, no. 6, (1960).
- [20] L. Trefethen and D. Bau, *Numerical Linear Algebra*. Other Titles in Applied Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), (1997).
- [21] O. Osenda, P. Serra, and S. Kais, “Dynamics of entanglement for two-electron atoms,” vol. 6, pp. 303–316, (2008).
- [22] W. Press, *FORTRAN Numerical Recipes: Numerical recipes in FORTRAN 90 : the art of parallel scientific computing*. FORTRAN Numerical Recipes, Cambridge University Press, 1996.
- [23] R. Burden, J. Faires, and A. Burden, *Numerical Analysis*. Cengage Learning, (2015).
- [24] M. Andrews, “The effect of linear terms in a quadratic hamiltonian,” *arXiv:0906.3571*, (2009).