

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE CIENCIAS



TESIS

“PROPIEDADES ESPECTRALES DEL POLARÓN DE
BOSE EN DOS DIMENSIONES”

PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL DE:
LICENCIADO EN FÍSICA

ELABORADO POR:
LUIS FERNANDO CÁRDENAS CASTILLO

ASESOR:
Dr. Arturo Camacho Guardian

LIMA - PERÚ

2023

Dedicatoria

*A mi familia, por haberme acompañado durante todo este largo camino,
a mis compañeros y docentes, con quienes aprendí todo lo que sé,
a mi asesor, cuya paciencia inagotable permitió dar a luz este trabajo,
y a todo aquel quien me haya motivado en los momentos más difíciles,
Muchas gracias.*

Publicaciones

Los resultados de esta tesis de licenciatura se encuentran publicados en la revista *Atoms*

- *Atoms* 2023, 11(1), 3;

<https://doi.org/10.3390/atoms11010003> (DOI registrado)

Recibido: 17 Octubre 2022 / Revisado: 12 Diciembre 2022 / Aceptado: 22 Diciembre 2022 / Publicado: 29 Diciembre 2022 *Atoms*.

Strongly interacting Bose polarons in two-dimensional atomic gases and quantum fluids of polaritons. **Luis Fernando Cárdenas-Castillo** and Arturo Camacho Guardian (2022).

Índice general

Dedicatoria	II
Publicaciones	III
CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Generalidades.....	1
1.2 Antecedentes investigativos	2
1.3 Descripción del problema de investigación	3
1.4 Objetivos del estudio	4
CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO Y CONCEPTUAL.....	5
2.1 Marco Teórico	5
2.1.1 Función de Partición gran canónica.....	5
2.1.2 Gases Cuánticos Ideales	7
2.2 Cuasipartículas.....	10
2.2.1 Importancia de la Función de Green	11
2.3 Marco Conceptual.....	18
2.3.1 Ecuación de Dyson.....	18
2.4 Matriz T	23
CAPÍTULO III. DESARROLLO DEL TRABAJO DE INVESTIGACIÓN ..	33
3.1 Construcción del Hamiltoniano de Frohlich.....	33
3.2 Obtención de la energía del polarón.....	38

3.3 Función posibles para la autoenergía	46
3.4 Implementación numérica.....	48
CAPÍTULO IV. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	52
CAPÍTULO V. CONCLUSIONES.....	61
APÉNDICES	63
A. Formalismos	63
A.1 Segunda Cuantización	63
A.2 Estados Coherentes.....	63
A.3 Ecuación de Movimiento	67
B. Otros Formalismos	68
B.1 Integrales Gaussianas	68
B.2 Acción de un sistema físico	70
B.3 Desarrollo de la amplitud de transición como una funcional integral.....	71
C. Resonancia de Feshbach en dos dimensiones	75
C.1 Fundamentos preliminares	75
C.2 Aplicación al caso de dos dimensiones.....	78
Bibliografía.....	79

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1. Generalidades

El trabajo de esta tesis se enfoca en el estudio del comportamiento de impurezas en gases bosónicos ultrafríos. Para esto es necesario que, entre otros conceptos, se tenga claro la idea de superfluidez y superconductividad. La superfluidez es un fenómeno colectivo en donde las partículas que componen el sistema pueden fluir sin fricción o disipación de calor, y la superconductividad es una superfluidez cargada eléctricamente [22]. Por otro lado en el aspecto cuántico, las partículas pueden ser de naturaleza bosónica o fermiónica, según como sea su comportamiento con otras partículas de su misma especie.

A temperaturas muy bajas, es posible estudiar a los condensados de Bose-Einstein (BEC), los cuales son un estado de fuerte atracción formado por la condensación de fermiones ligados en el espacio real, conocidos como **bosones moleculares**, donde un número macroscópico de bosones ocupan una sola función de onda y, debido a su naturaleza bosónica, es posible acumularlos en el mismo estado [44], además los pares así formados son mucho más pequeños que su separación promedio y se presenta un traslape de estados muy ligero en el espacio real [41]. Esto contrasta con la naturaleza de los fermiones, donde partículas idénticas no pueden ocupar la misma función de onda debido al principio de exclusión de Pauli.

1.2. Antecedentes Investigativos

Este interés por la materia ultrafría nace en 1911 por Heike Kamerlingh Onnes [1], en un experimento en donde enfrió una muestra de Hg por debajo de los 4.2 K usando Helio-4 y encontró que la muestra conducía electricidad sin disipación, razón por la que denominó a este fenómeno **superconductividad**.

Posteriormente, diversos estudios colaboraron a la evolución de las teorías de muchos cuerpos a bajas temperaturas. En 1946, Bogoliubov [2] propone una explicación microscópica para la superfluidéz, y presenta que las débiles interacciones repulsivas no destrúan el estado BEC, y que la formación del estado BEC no garantiza la superfluidéz, pues depende de la existencia de corrientes que fluyen sin disipación y requiere de correlaciones - interacciones entre bosones. En el mismo año, Richard Ogg [3] propone la posibilidad de emparejar electrones en el espacio real de modo que cumplan con la estadística de Bose-Einstein, tras alcanzar la superconductividad en soluciones de metal-amoniaco. Tras otros intentos, fue en 1957 que Bardeen, Cooper y Schrieffer proponen una teoría para la superconductividad denominada **teoría BCS** [4], la cual básicamente es una teoría de atracción débil donde se sugiere el emparejamiento de electrones con espín y momentos lineales opuestos que se da en el espacio de momentos, obteniendo los denominados **pares de Cooper** [5], los cuales aparecían debido a que, matemáticamente, los pares de Cooper son más estables que un electrón individual dentro de la red, lo que permite experimentar menor resistencia; y físicamente, los pares de Cooper son más resistentes que los electrones individuales a las vibraciones dentro de la red, ya que la atracción a su par lo mantiene más estable. Por ello, los pares de Cooper se mueven a través de la red prácticamente sin ser afectados por las vibraciones térmicas (fonones) por debajo de la temperatura crítica T_c , en la que se ve la transición a fase superconductora. Se propuso la idea de un estado colectivo en donde muchos pares de electrones (o de fermiones) actúan juntos para producir al estado de cero resistencia, visto mediante una función de onda de muchas partículas que corresponden a un gran traslapamiento de pares de fermiones con momentum nulo del centro de masa, cero

momento angular (s-wave) y cero espín total (singlete) [12]. La teoría BCS enfrentó todos estos retos e hizo predicciones cuantitativas para las propiedades de los superconductores. Tras el éxito de la teoría BCS, se fueron descubriendo varios fenómenos cuánticos de muchos cuerpos que se sostenían en esta teoría, tales como la interferencia de dos BEC traslapados [6], la fase de coherencia de rango largo [7], vórtices cuantizados [8] entre otros. Lo que todos estos fenómenos tienen en común es la existencia de un estado coherente de muchos cuerpos, el cual es un concepto que se introdujo fenomenológicamente por Ginzburg y Landau en 1950 [9], con el fin de explicar más a fondo la superconductividad.

Recientemente, un punto de interés es el estudio de gases cuyas componentes presentan poblaciones muy desbalanceadas, donde los átomos mayoritarios o medio circundante llevan una amplia diferencia de población con los átomos minoritarios, también llamados impurezas [10]. Cuando éstas impurezas interactúan con el entorno forman cuasipartículas llamadas **polarones**. El entendimiento de la física de los polarones al interactuar con su medio es un problema central en los sistemas de muchos cuerpos. Este problema fue abordado inicialmente por Landau y Pekar [11], quienes demostraron que los electrones en un medio dieléctrico son vestidos por fonones formando a los ya mencionados polarones. Las impurezas que interactúan con los átomos del medio son denominadas polarones de Fermi o de Bose según sea la naturaleza del medio [20].

1.3. Descripción del problema de Investigación

En este trabajo nos enfocamos en los polarones de Bose y su comportamiento en sistemas bidimensionales, resaltando sus propiedades espectrales. Para ello, en el primer capítulo se define la función de Green del sistema y sus principales propiedades, ya que la función de Green es una poderosa herramienta que permite estudiar los estados ligados del sistema con y sin interacción, además de ofrecer la masa efectiva y el tiempo de vida del polarón. Y, a su vez, para esto se construye la matriz T , la cual permite explicar la evolución de los estados propios del sistema tras la interacción.

La construcción de la matriz T es dada de dos formas diferentes: la primera es mediante el uso de series de Born y la segunda es mediante una derivación a partir de la ecuación de Schrodinger, corroborando así la equivalencia entre ambos métodos.

En el segundo capítulo, se hace la descripción de los estados ligados del polarón de Bose partiendo del Hamiltoniano de Fröhlich y usando dos importantes herramientas: la ecuación de Dyson y el ansatz de Chevy, y finalmente se muestra una implementación numérica de la función espectral del sistema, dependiente de la energía del polarón y de la longitud de dispersión, bajo aproximación a estado fundamental.

1.4. Objetivos del Estudio

El objetivo principal de esta investigación es entender las propiedades de cuasipartícula de una impureza fuertemente acoplada a un condensado atómico de Bose - Einstein en dos dimensiones, dichos resultados permitirán entender el comportamiento de las impurezas cuánticas y propiedades relacionadas con su movilidad, vida media y energía. Cabe resaltar que el estudio de impurezas más allá del modelo de Frohlich incluyendo resonancias de Feshbach es un proyecto original, que no ha sido estudiado previamente por la comunidad. Los resultados de este trabajo serán relevantes para la extensión de este modelo a sistemas de la materia condensada y óptica cuántica.

Capítulo 2

MARCOS TEÓRICO Y CONCEPTUAL

2.1. Marco Teórico

2.1.1. Función de Partición gran canónica

En esta primera sección, se introduce el desarrollo de la función de partición a través de funcionales integrales que permiten relacionar el aspecto estadístico con el mecánico-cuántico para darle un sentido físico claro a las herramientas que serán usadas posteriormente.

De la física estadística, sabemos que las propiedades de equilibrio de un sistema interactuante en el ensamble gran canónico de muchos cuerpos siguen de una función de partición gran canónica [14]

$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right], \quad (2.1)$$

donde $\beta = 1/k_B T$, μ es el potencial químico, T es la temperatura absoluta del sistema, \hat{H} y \hat{N} son los operadores Hamiltoniano y número de partículas, respectivamente. Nuestro objetivo es evaluar esta cantidad combinando la teoría cuántica de muchos cuerpos con la

integral de caminos de Feynman.

Así como se verá, este objetivo se alcanzará escribiendo la función de partición como una funcional integral sobre campos dependientes del tiempo $\phi_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$, en la misma manera escribimos la función de partición para una partícula individual como una integral de caminos sobre trayectorias dependientes del tiempo $\mathbf{x}(\tau)$. Estos campos realmente son autovalores de los estados coherentes [Ap. A], así la ecuación (2.1) se puede expresar en la representación de estados coherentes

$$Z = \int \prod_\alpha \frac{d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha}{\pi} \exp \left[\sum_\alpha \phi_\alpha^* \phi_\alpha \right] \langle \phi_\alpha | e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} | \phi_\alpha \rangle \quad (2.2)$$

el término ubicado entre los bra-kets puede ser acomodado de forma que pueda expresarse en función del operador de evolución, haciendo el cambio $\beta = i\tau/\hbar$. Es posible ver que ahora la ecuación (2.2) tiene el valor de expectación del operador de evolución en distintos estados $|\phi_\alpha\rangle$, usando [Ap. B3] y aplicar la rotación de Wick ($t = -i\tau$) [46] para la forma de este valor de expectación, se tiene

$$\langle \phi | e^{-it(\hat{H} - \mu \hat{N})/\hbar} | \phi \rangle = \int \prod_{j=1}^N \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{\pi} \cdot \exp(\phi^*(\hbar\beta)\phi(\hbar\beta)) \exp(-S_E[\phi_j, \phi_j^*]/\hbar), \quad (2.3)$$

donde lo que se hizo fue separar en N espacios el tiempo τ , que va desde 0 a $\hbar\beta$, se aplica el operador evolución N veces sobre el estado dado en el tiempo inicial. De esto, aplicándolo en (2.2)

$$Z = \oint d[\phi^*] d[\phi] \exp[-S_E[\phi, \phi^*]/\hbar], \quad (2.4)$$

donde la acción euclidiana (aplicable sobre el espacio euclidiano [42]) $S_E[\phi, \phi^*]$ está determinada por

$$S_E[\phi^*, \phi] = i \int d\tau \left[\hbar \int d\mathbf{x} \phi(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi(\tau) + H(\phi^*(\tau), \phi(\tau)) \right].$$

Definimos al **Hamiltoniano funcional gran canónico** [41] como

$$\begin{aligned} H[\phi^*, \phi] = & \sum_\alpha \int d\mathbf{x} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V^{ex}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \phi_\alpha(\mathbf{x}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) \phi_{\alpha'}^*(\mathbf{x}') V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}') \phi_\alpha(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

La ecuación (2.5) se sigue de la forma de la segunda-cuantización del Hamiltoniano y del operador número, juntos con la propia definición de estados coherentes, es decir $\hat{\phi}_\alpha(\mathbf{x})|\phi\rangle = \phi_\alpha(\mathbf{x})|\phi\rangle$ y $\hat{\phi}_\alpha^\dagger|\phi\rangle = \phi_\alpha^*(\mathbf{x})|\phi\rangle$, V^{ex} es un potencial externo, que no genera interacción entre las partículas del sistema y $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ es el potencial que refleja la interacción entre partículas, ubicadas en los puntos \mathbf{x} y \mathbf{x}' .

La notación abreviada para la medida de la integración considerando que N tiende al infinito ahora resulta

$$\begin{aligned} \int d[\phi^*]d[\phi] &= \int \prod_{j=1}^N d[\phi_j^*]d[\phi_j] = \int \prod_{j=1}^N \prod_{\alpha} \frac{d\phi_{j,\alpha}^* d\phi_{j,\alpha}}{\pi} \\ &= \int \prod_{\alpha} d[\phi_\alpha^*]d[\phi_\alpha], \end{aligned} \quad (2.6)$$

lo cual, en principio, describe la forma de integración en base a una nueva medida [45], ya que en principio las diferenciales solo se valían de un solo índice, y luego se valdrán de dos. Con este primer resultado podremos entrar en detalle a la descripción de sistemas de muchos cuerpos a bajas temperaturas, pero antes es necesario estudiar un sistema ideal, para luego tomarlo de base para describir a los sistemas con interacciones entre partículas.

2.1.2. Gases Cuánticos Ideales

Sea la función de partición Z_0 de un gas cuántico ideal sin interacción entre partículas. Se deja entendido que en (2.3) se tiene una sumatoria en el exponente de la acción sobre los índices α . Para el gas cuántico no interactuante, tenemos de (2.4) y (2.5)

$$S_0[\phi^*, \phi] = i \sum_{\alpha} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\mathbf{x} \phi_\alpha^*(\mathbf{x}, \tau) \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar \nabla^2}{2m} + V^{ex}(\mathbf{x}) - \mu \right\} \phi_\alpha(\mathbf{x}, \tau), \quad (2.7)$$

y evaluando la función de partición, ésta se reduce para realizar una integral gaussiana sobre los campos. Una de las formas posibles para evaluar la acción en la función de partición para encontrar una expresión para la energía del sistema es el método de la función de Green.

Método de la función de Green

Es la técnica más conveniente y versátil, también la que se extiende más fácil para los gases cuánticos interactuantes. El método consta en introducir explícitamente la inversa de la función de Green no interactuante $G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$, la cual se puede apreciar que aparece cuando la función evaluada es una función generadora [Ap. B1]

$$Z_0[J, J^*] = \int d[\phi^*]d[\phi] \exp \left\{ \sum_{\alpha} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\mathbf{x} \sum_{\alpha'} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \right. \\ \left. \times \int d\mathbf{x}' \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') + \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) J_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + J_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \phi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \right\}, \quad (2.8)$$

donde, siguiendo el camino trazado en el Apéndice B1, se entiende que al medir correlaciones, se tendrá

$$\frac{1}{Z_0} \frac{\delta^2 Z_0[J, J^*]}{\delta J_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \delta J_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau')} = \langle \phi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \rangle = -G_{0,\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau'), \quad (2.9)$$

lo cual podría obtenerse únicamente añadiendo los términos $\phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) J_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau) + J_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \phi_{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)$ al exponente de la función de partición, es decir que una forma tentativa de expresar ésta función es

$$Z_0 = \int d[\phi^*]d[\phi] \exp \left\{ \sum_{\alpha} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int d\mathbf{x} \sum_{\alpha'} \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \int d\mathbf{x}' \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \right\}, \quad (2.10)$$

donde la función específica $G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ que conduce a esta expresión aún tiene que determinarse. Para recuperar la forma de la acción, se ve que hay integrales e índices que no deberían aparecer, los cuales pueden omitirse si se añaden deltas de Dirac y Kronecker, respectivamente. Aplicando esto a (2.7)

$$-\frac{1}{\hbar} S_0[\phi^*, \phi] = \sum_{\alpha,\alpha'} \int d\tau \int d\tau' \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \\ = -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha,\alpha'} \int d\tau \int d\tau' \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \phi_{\alpha}^*(\mathbf{x}, \tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m} + V^{ex} - \mu \right] \\ \times \phi_{\alpha'}(\mathbf{x}', \tau') \delta_{\alpha,\alpha'} \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.11)$$

factorizando las integrales y sumatorias

$$G_{0;\alpha,\alpha'}^{-1}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m} + V^{ex} - \mu \right\} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (2.12)$$

y operando la inversa en ambos miembros, finalmente se obtiene

$$\delta_{\alpha,\alpha'} \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m} + V^{ex} - \mu \right\} G_{0;\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau'). \quad (2.13)$$

Se muestra de (2.13) que $G_{0;\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$ de hecho, es **una función de Green en el aspecto matemático**. Para continuar, se define el valor de expectación de los operadores campo sometidos a un ordenamiento temporal, a través del teorema de Wick [43]

$$\begin{aligned} & \langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle \\ & \equiv \theta(\tau - \tau') \langle \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau') \rangle + \theta(\tau - \tau') \langle \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle, \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal [41], $\langle \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau') \rangle$ da la probabilidad para que una partícula individual que fue añadida en (\mathbf{x}', τ') sea encontrada en (\mathbf{x}, τ) y $\theta(\tau - \tau')$ es la función de Heaviside.

Ya que el valor de expectación es determinado en el ensamble gran canónico, vemos que el operador de Heisenberg de tiempo imaginario $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$ es definido como

$$\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) = e^{(\hat{H} - \mu \hat{N})\tau/\hbar} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-(\hat{H} - \mu \hat{N})\tau/\hbar}, \quad (2.15)$$

y obedece la ecuación de movimiento de Heisenberg

$$i\hbar \partial_\tau \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) = \hat{H} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau), \quad (2.16)$$

en combinación con (2.14) se llega a

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle &= \hbar \delta(\tau - \tau') \langle [\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau), \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle \\ &+ i\hat{H} \langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle, \end{aligned} \quad (2.17)$$

usando las relaciones de conmutación a tiempos iguales

$$[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau), \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau)] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad (2.18)$$

entonces, habiendo un factor $\delta(\tau - \tau')$ que permita usar esta propiedad

$$-\frac{1}{\hbar} \left\{ \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{H} \right\} [-i \langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\alpha, \alpha'} \quad (2.19)$$

de esto se puede ver que, comparando con (2.13), la función de Green también se puede describir usando

$$G_{0; \alpha, \alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = -i \langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle, \quad (2.20)$$

que es la forma en que la función de Green para sistemas de muchos cuerpos suele encontrarse con mayor frecuencia en la literatura. [14,41].

2.2. Cuasipartículas

En un gas cuántico no interactuante, las energías de los estados de partículas individuales con masa m están dadas por

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu, \quad (2.21)$$

y la presencia del potencial químico μ implica que se trabaja en el ensamble gran canónico. Esta relación también es llamada **relación de dispersión o de energía-momento para las partículas**. Si el gas cuántico se convierte interactuante, entonces las partículas ya no actuarán como si estuvieran separadas, ya que percibirán al medio que las rodea. Como resultado, las interacciones entre las partículas cambian la dispersión (2.21), donde la razón física para este cambio es que las partículas que viajan a través del gas ahora tienen que mover a otras partículas de su camino (las repele) o arrastrar temporalmente a las partículas vecinas (las atrae). El nuevo objeto compuesto por la partícula y su entorno a menudo se comporta muy parecido a una partícula, por ello es sugestivo llamar a este compuesto como **cuasipartícula**, y el espectro de excitación resultante de la partícula individual en presencia de un medio interactuante es llamado **espectro de excitación de la cuasipartícula**.

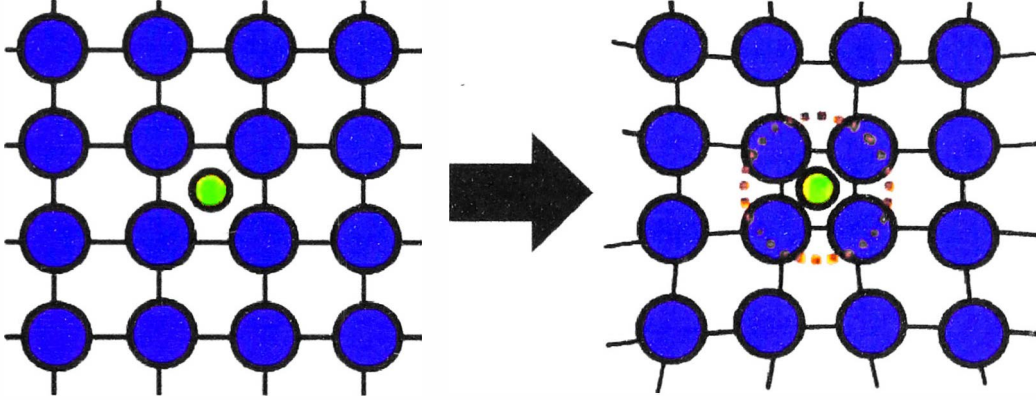


Figura 2.1: Impureza sin interacción pasa a interactuar con el medio que los rodea, formando una cuasipartícula

Para dar una base sólida al concepto de cuasipartícula consideraremos la función de Green interactuante $G_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau')$, y se buscará el espectro de excitación de la cuasipartícula para nuestro sistema de interés, y el valor de expectación de cualquier observable de una partícula, todo esto a partir de la revisión de las propiedades y la importancia de la función de Green para el estudio de sistemas de muchos cuerpos.

2.2.1. Importancia de la Función de Green

Para simplificar la notación, se usarán los operadores \hat{A} y \hat{B} en lugar de los operadores de campo $\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau)$, lo cual se volverá al cambiar al final para el análisis de resultados. Se procede a desarrollar en función del operador ordenamiento temporal,

$$T_\eta(\hat{A}(t), \hat{B}(t')) = \Theta(t - t')\hat{A}(t)\hat{B}(t') - \eta\Theta(t' - t)\hat{B}(t')\hat{A}(t),$$

en donde $\eta = -1$ si los operadores conmutan y $\eta = +1$ si los operadores anticonmutan al evaluar su evolución temporal

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}_0]_\eta, \quad \hat{A}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

La función de Green de (2.20) puede separarse en dos partes

$$G_{A,B}^a(t, t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t' - t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{propagador avanzado}),$$

$$G_{A,B}^r(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\eta} \rangle \quad (\text{propagador retardado}),$$

entonces la función de Green vista anteriormente sería el **propagador causal** [50], dado por

$$G_{A,B}^c(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle T_{\eta} [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle, \quad (2.22)$$

Sea la función de correlación entre \hat{A} y \hat{B}

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} e^{i\hat{H}ot/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}ot'/\hbar} e^{i\hat{H}ot'/\hbar} \hat{B} e^{-i\hat{H}ot'/\hbar} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \hat{A}(t - t') \hat{B}(0) \right) = \langle \hat{A}(t - t') \hat{B}(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

De forma similar para $\langle \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = \langle \hat{B}(0) \hat{A}(t - t') \rangle$, lo cual implica

$$G_{A,B}^r(t, t') = G_{A,B}^r(t - t'), \quad (2.24)$$

así es como se ve que la función de Green solo depende de la diferencia entre los tiempos de medición.

Ahora, sea $\hat{H}|l\rangle = E_l|l\rangle$, entonces el valor de expectación de \hat{A} es

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \frac{1}{Z} \sum_l e^{-\beta E_l} \langle l | \hat{A} | l \rangle, \quad (2.25)$$

y sea la función de correlación

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}(t) \hat{B}(0) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{l,m} e^{-\beta E_l} \langle l | \hat{A}(t) \hat{B}(0) | l \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_l e^{-\beta E_l} e^{it(E_l - E_m)} \langle l | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | l \rangle, \end{aligned} \quad (2.26)$$

también

$$\langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{l,m} e^{-\beta E_m} e^{it(E_l - E_m)} \langle l | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | l \rangle, \quad (2.27)$$

si se representa (2.27) en forma de una transformada de Fourier

$$\langle \hat{B}(0)\hat{A}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (2.28)$$

mediante la transformada inversa

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{B}(0)\hat{A}(t) \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{l,m} e^{-\beta E_m} \langle l|\hat{A}|m \rangle \langle m|\hat{B}|l \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it(\hbar\omega - E_m + E_l)/\hbar}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

usando la relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{it\omega} = 2\pi\delta(\omega)$$

se obtiene

$$J(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{l,m} e^{-\beta E_m} \langle l|\hat{A}|m \rangle \langle m|\hat{B}|l \rangle \delta(\hbar\omega - E_m + E_l), \quad (2.30)$$

siguiendo el mismo camino para (2.26), se tiene que

$$\langle \hat{A}(t)\hat{B}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{\beta\hbar\omega} J(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (2.31)$$

De la definición del propagador retardado, se obtiene su representación en transformada de Fourier

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(\omega) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt [\Theta(t) [\langle \hat{A}(t)\hat{B} + \eta\hat{B}\hat{A}(t) \rangle]] e^{i\omega t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt [\Theta(t) [\langle \hat{A}(t)\hat{B} + \eta\langle \hat{B}\hat{A}(t) \rangle]] e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

de (2.28) y (2.31)

$$G_{A,B}^r(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} (e^{\beta\hbar\omega'} + \eta) J(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \omega')t} \Theta(t), \quad (2.33)$$

haciendo

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \Theta(t) = \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + i\epsilon)t} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{i}{\omega + i\epsilon} \right), \end{aligned} \quad (2.34)$$

y su transformada inversa

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{(ie^{-i\omega t})}{(\omega + i\epsilon)},$$

haciendo el cambio $\omega \rightarrow \omega - \omega'$

$$F(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(\omega - \omega')}{2\pi} \left[\frac{ie^{i(\omega - \omega')t}}{\omega - \omega' + i\epsilon} \right],$$

aplicando en (2.33)

$$G_{A,B}^r(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi\hbar} \frac{(e^{\beta\hbar\omega'} + \eta)J(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \right], \quad (2.35)$$

separando en dos partes

$$G_{A,B}^r(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi\hbar} \frac{e^{\beta\hbar\omega'} J(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} + \eta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi\hbar} \frac{J(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \right],$$

usando (2.31)

$$G_{A,B}^r(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{Z} \sum_{l,m} \frac{(e^{-\beta E_l} + \eta e^{-\beta E_m}) \langle l | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | l \rangle}{\hbar\omega - (E_m - E_l) + i\epsilon} \right], \quad (2.36)$$

y debido a la identidad de Sokhotski [44]

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{\omega \pm i\epsilon} \right) = \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega} \right) \mp i\pi\delta(\omega),$$

se tiene

$$\begin{aligned} G_{A,B}^r(\omega) - G_{A,B}^a(\omega) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi\hbar} (e^{\beta\hbar\omega'} + \eta) J(\omega') \left(\frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} - \frac{1}{\omega' - \omega - i\epsilon} \right) \\ &= -i(e^{\beta\hbar\omega} + \eta)J(\omega), \end{aligned}$$

en caso que tengamos $\hat{A} = \hat{B}^\dagger$

$$\begin{aligned} \frac{G_{A,A^\dagger}^r(\omega) - G_{A,A^\dagger}^a(\omega)}{2i} &= \text{Im}G_{A,A^\dagger}^r(\omega) = -\frac{(e^{\beta\hbar\omega} + \eta)}{2} J(\omega), \\ J(\omega) &= -\frac{2}{(e^{\beta\hbar\omega} + \eta)} \text{Im}G_{A,A^\dagger}^r(\omega), \end{aligned} \quad (2.37)$$

aplicando en (2.35)

$$G_{A,A^\dagger}^r(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi \hbar} \frac{\text{Im} G_{A,A^\dagger}^r(\omega')}{\omega - \omega' + i\epsilon} \right], \quad (2.38)$$

es decir, cuando $\hat{A}^\dagger = \hat{B}$, la información sobre la función de Green está completamente contenida en su parte imaginaria, siendo ésta la razón por la cual, cuando busquemos medir el espectro del sistema, tendremos que usar la parte imaginaria de la función de Green.

Ahora, se buscará aplicar lo visto hasta ahora para los operadores de campo $\hat{A} = \hat{\Psi}_{k,\alpha}$ y $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$. Sea un sistema de fermiones no interactuantes

$$\hat{H} = \sum_{k,\alpha} (\varepsilon_k - \mu) \Psi_{k,\alpha}^\dagger \Psi_{k,\alpha}, \quad (2.39)$$

sabiendo que se cumple

$$[\Psi_{k,\alpha}, \hat{H}]_- = (\varepsilon_k - \mu) \Psi_{k,\alpha}, \quad (2.40)$$

así, usando la ecuación de movimiento [Ap. A3]

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\omega + i\epsilon) G_{k,k'}^r(\omega) = \langle [\Psi_{k,\alpha}, \Psi_{k',\alpha'}^\dagger]_+ \rangle + (\varepsilon_k - \mu) G_{k,k'}^r(\omega), \quad (2.41)$$

y como $[\Psi_{k,\alpha}, \Psi_{k',\alpha'}] = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{k,k'}$, además

$$G_{k,k'}^r(\omega) = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{k,k'} G_k^r(\omega), \quad (2.42)$$

haciendo $k = k'$ y $\alpha = \alpha'$, en (2.41)

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\hbar\omega + i\epsilon - \varepsilon_k + \mu) G_{k,\alpha}^r(\omega) &= 1, \\ G_{k,\alpha}^r(\omega) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k + \mu + i\epsilon} \right), \end{aligned} \quad (2.43)$$

separando en parte real e imaginaria

$$G_{k,\alpha}^r(\omega) = \mathcal{P} \left(\frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k + \mu} \right) - \underbrace{i \hbar\pi \delta(\hbar\omega - \varepsilon_k + \mu)}_{\text{parte imaginaria}}$$

de esto

$$-\frac{1}{\pi\hbar}\text{Im}G_{k,\alpha}^r(\omega) = \delta(\hbar\omega - \varepsilon_k + \mu),$$

donde, por (2.38)

$$A_\alpha(\hbar\omega - \varepsilon_k + \mu) = -\frac{1}{\pi\hbar}\text{Im}G_{k,\alpha}^r(\omega) \quad (2.44)$$

es la **función espectral**, en este caso aplicado a un sistema sin interacción.

Por otro lado, si se toma $t = t' = 0$ en (2.28)

$$\langle \hat{B}(0)\hat{A}(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J(\omega)$$

haciendo $\hat{A}(0) = \hat{\Psi}_{k,\alpha}$ y $\hat{B}(0) = \hat{\Psi}_{k,\alpha}^\dagger$ y aplicando en (2.38)

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{k,\alpha}^\dagger \Psi_{k,\alpha} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} (-2f(\omega)\text{Im}G_k^r(\omega)) \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi\hbar} f(\omega) (-\pi\hbar\delta(\omega - \varepsilon_k + \mu)) = f(\varepsilon_k - \mu), \end{aligned}$$

donde

$$f(\varepsilon_k - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} \quad (\text{para fermiones}), \quad (2.45)$$

donde se ve que la función de Green se relaciona con la densidad de partículas del sistema. Lo expuesto en esta última parte muestra la versatilidad que tiene la función de Green. Siendo la parte imaginaria de su expresión en el espacio de frecuencias la más importante por ser necesaria y suficiente para poder describir el desarrollo y la composición de un sistema de muchos cuerpos, dando forma a su espectro de frecuencias mediante su función espectral, y por dar la densidad de partículas del sistema en el estado inicial. Se entiende que estos resultados, si bien se mostraron para un caso sin interacción en (2.43), es posible extender estos resultados a sistemas interactuantes.

Al estudiar casos reales, los parámetros más importantes son los momentos lineales, las frecuencias y las energías, las cuales nos permiten tener una visión panorámica de cómo se

comporta el sistema en estudio. Descomponiendo la función de Green usando (2.14)

$$\begin{aligned} G_{0;\alpha,\alpha'}(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= -i\langle T[\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle \\ &\equiv -i\theta(\tau - \tau')\langle \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau)\hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau') \rangle - i\theta(\tau - \tau')\langle \hat{\psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')\hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \rangle, \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde se vió que el primer término es el **propagador retardado**, el segundo elemento es el **propagador adelantado**, y en conjunto, a la función de Green se le llama también **propagador causal**, el subíndice 0 indica que se aplica a un sistema sin interacción.

Expresando al ket $|x\rangle$ en función a una base de kets $|\phi_v\rangle$ como

$$|x\rangle = \sum_v |\phi_v\rangle\langle\phi_v|x\rangle = \sum_v \phi_v^*(x)|\phi_v\rangle, \quad (2.47)$$

y haciendo las siguientes consideraciones

$$\hat{\psi}^\dagger(x, t) = \sum_v \phi_v^*(x)\hat{c}_v^\dagger(t), \quad \hat{\psi}(x, t) = \sum_v \phi_v(x)\hat{c}_v(t), \quad (2.48)$$

y considerando únicamente al propagador retardado ($t > t'$), se tiene que

$$G_0^r(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = -i\Theta(t - t')\langle [\hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle, \quad (2.49)$$

reemplazando (2.48)

$$\begin{aligned} G_0^r(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') &= -i\Theta(t - t')\langle [\sum_v \phi_v(x)\hat{c}_v(t), \sum_{v'} \phi_{v'}^*(x')\hat{c}_{v'}^\dagger(t')] \rangle \\ &= \sum_{v,v'} \phi_v(x)\phi_{v'}^*(x')[-i\Theta(t - t')\langle [\hat{c}_v(t), \hat{c}_{v'}^\dagger(t')] \rangle], \end{aligned} \quad (2.50)$$

de esto se tiene una expresión más pequeña que no considera variables espaciales. Tomando para $v = v'$

$$G_0^r(v, \tau, \tau') = -i\Theta(t - t')\langle [\hat{c}_v(t), \hat{c}_v^\dagger(t')] \rangle, \quad (2.51)$$

considerando lo obtenido anteriormente, se puede llegar a

$$G_0^r(v, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\hbar}{Z} \sum_{n,m} \frac{(e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}) |\langle m|\hat{c}_v^\dagger|n\rangle|^2}{\hbar\omega + (E_n - E_m) + i\eta}, \quad (2.52)$$

esta es la denominada **representación de Lehmann** del propagador retardado, el cual está expresado en el espacio de frecuencias, y mediante sus polos permite hallar los estados ligados del sistema, evitando las singularidades mediante un término infinitesimal dado por η .

2.3. Marco Conceptual

2.3.1. Ecuación de Dyson

Hasta el momento, se ha tratado el caso de un sistema sin interacción, el cual en sí es el más sencillo de abordar, pues hay más herramientas adicionales que permiten corroborar la eficacia de la definición de la función de Green. Ahora buscaremos tratar casos con interacción, los cuales tienen como fundamento principal la teoría de perturbaciones, donde según sea el orden de perturbación, se puede apreciar la aparición de una infinidad de términos. Sin embargo, es posible mostrar que éstos términos pueden reducirse a una sola función denominada **autoenergía**, la cual ayudará a encontrar los estados ligados del sistema con interacciones siguiendo un método no perturbativo.

Para empezar, se inicia con las ecuaciones de Schrodinger

$$\begin{aligned}(E - \hat{H})\Psi_E(\mathbf{x}) &= 0, \\ (E - \hat{H}_0)\Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}) &= 0,\end{aligned}$$

donde se define $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, siendo el caso en el que la interacción entre átomos no cambia de forma considerable la energía total E del sistema. Además, la función de Green cumple por (2.19)

$$\begin{aligned}(E - \hat{H})G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) &= \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \\ (E - \hat{H}_0)G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) &= \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'),\end{aligned}$$

omitiendo por simplicidad los subíndices α, α' y notando que, por (2.24), la función de Green solo depende de un parámetro temporal τ , por lo que también se omite el factor

$\delta(\tau - \tau')$ visto en (2.19). De esto, considerando que $\Psi_E^{(0)}(\mathbf{x})$ es la solución homogénea de la ecuación de Schrodinger, la función de onda del sistema con interacción resulta

$$\Psi_E(\mathbf{x}) = \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}) + \int G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E(\mathbf{x}') d\mathbf{x}',$$

análogamente se tiene

$$\Psi_E(\mathbf{x}) = \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}) + \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}',$$

comparando

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}') &= G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E(\mathbf{x}') \\ &= G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \left[\Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}) + \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \right] \\ &= G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}) + G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \Psi_E^{(0)}(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \end{aligned}$$

factorizando

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) = G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) + G_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) \hat{V}(\mathbf{x}') \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau) d\mathbf{x}',$$

donde ya es posible apreciar la recursividad. Aplicando la transformada de Fourier, se tiene

$$G(\omega) = G_0(\omega) + G_0(\omega) \hat{V} G(\omega), \quad (2.53)$$

ahora, haciendo $\langle q | \hat{V} | k \rangle = V_{kk}$, $\langle q | G_0(\omega) | k \rangle = G_0(k, \omega) \delta_{k,q}$ y usando la completitud de los estados $\sum_k |k\rangle \langle k| = \hat{I}$ se ve que al aplicar los autoestados $|k\rangle$ por derecha y por izquierda se tiene [19]

$$G(k, k, \omega) = G_0(k, \omega) + G_0(k, \omega) V_{kk} G_0(k, \omega) + \sum_q G_0(k, \omega) V_{kq} G_0(q, \omega) V_{qk} G_0(k, \omega) + \dots$$

Aquí se define la cantidad $\Sigma(k, \omega)$ como la suma de todos los términos intermedios resultantes de estados inicial y final diferentes entre sí

$$\Sigma(k, \omega) = V_{kk} + \sum_{k \neq q} V_{kq} G_0(q, \omega) V_{qk} + \sum_{\substack{q \neq k \\ l \neq k}} V_{kq} G_0(q, \omega) V_{ql} G_0(l, \omega) V_{lk} + \dots \quad (2.54)$$

la forma diagramática de (2.54) se ve mediante la Fig. 2.2.

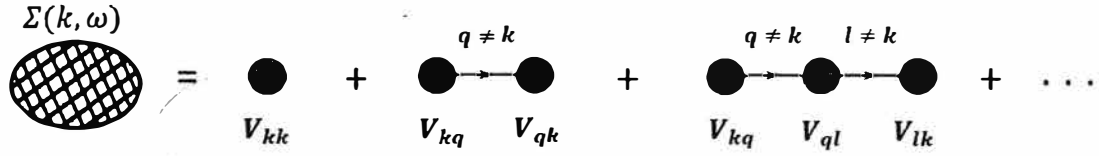


Figura 2.2: Representación diagramática de la autoenergía como suma de todos los términos con estados intermedios, con $k \neq q$ [19]

Usando esta definición de $\Sigma(k, \omega)$, se puede reescribir los diagramas de la ecuación de Dyson.

Ahora tendrá la forma

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega) + G_0(k, \omega)\Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega) + G_0(k, \omega)\Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega)\Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega) + \dots$$

esto puede mostrarse en diagramas de Feynman en la Fig. 2.3. Aplicando la identidad para una serie infinita

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega) \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} [\Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega)]^n \right]$$

$$= \frac{1}{G_0^{-1}(k, \omega) - \Sigma(k, \omega)}$$

finalmente, se tiene la ecuación de Dyson

$$\boxed{G^{-1}(k, \omega) = G_0^{-1}(k, \omega) - \Sigma(k, \omega)}$$

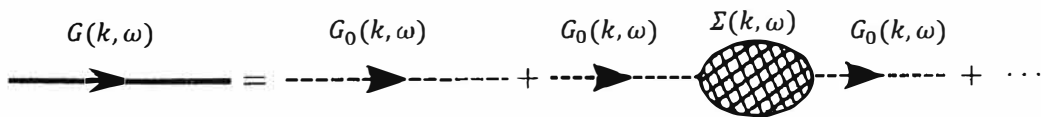


Figura 2.3: Diagrama de Feynman de la función de Green de un sistema con interacción

En base a lo mencionado en (2.43), se tiene

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k - \Sigma(k, \omega)}, \quad (2.55)$$

separando las componentes real e imaginaria de la autoenergía

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \varepsilon_k - \text{Re}(\Sigma(k, \omega)) - i\text{Im}(\Sigma(k, \omega))}, \quad (2.56)$$

siguiendo el análisis dado en (2.52), la energía de la cuasipartícula sería

$$E_{\text{pol}} = \varepsilon_k + \text{Re}(\Sigma(k, E_{\text{pol}})), \quad (2.57)$$

Buscando explorar nuevas propiedades las cuasipartículas, supongamos que éstas se encuentran bien definidas y existen para pequeñas excitaciones cercanas a E_{pol} y de bajo momentum. Tomando (2.56) y expandiendo la parte real de la autoenergía en serie de Taylor de primer orden, de modo que $(k, \omega) \rightarrow (0, E_{\text{pol}})$, se tiene

$$G(k, \omega) = \left(\hbar\omega - \left\{ \text{Re}[\Sigma(0, E_{\text{pol}})] + \frac{(\hbar\omega - E_{\text{pol}})}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \omega} (\varepsilon_k + \text{Re}[\Sigma(0, \omega)]) \right\} \Big|_{\hbar\omega = E_{\text{pol}}} + k^2 \frac{\partial}{\partial k^2} (\varepsilon_k + \text{Re}[\Sigma(k, E_{\text{pol}})]) \Big|_{k^2=0} \right)^{-1} - i\text{Im}[\Sigma(k, \omega)] \quad (2.58)$$

como E_{pol} es un polo para la función de Green, se entiende que todo el contenido entre las paréntesis grandes es igual a cero, de esto se tiene que

$$\hbar\omega - E_{\text{pol}} = \frac{k^2 \frac{\partial}{\partial k^2} (\varepsilon_k + \text{Re}[\Sigma(k, E_{\text{pol}})]) \Big|_{k^2=0} + i\text{Im}[\Sigma(k, \omega)]}{1 - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \omega} (\text{Re}[\Sigma(0, \omega)]) \Big|_{\hbar\omega = E_{\text{pol}}}}, \quad (2.59)$$

definiendo a la inversa del denominador del segundo miembro como el **residuo** de la **función de Green** $G(k, \omega)$ [20] en el polo $\hbar\omega = E_{\text{pol}}$ denotado por Z , se tendrá [54]

$$Z = \left(1 - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \omega} (\text{Re}[\Sigma(0, \omega)]) \Big|_{\hbar\omega = E_{\text{pol}}} \right)^{-1},$$

así, al acomodar los términos de (2.58) e introduciendo al residuo en la expresión,

$$G(k, \omega) = \frac{Z}{\hbar\omega - E_{\text{pol}} - Z k^2 \frac{\partial}{\partial k^2} (\varepsilon_k + \text{Re}[\Sigma(k, E_{\text{pol}})]) \Big|_{k^2=0} - iZ \text{Im}[\Sigma(k, \omega)]},$$

y finalmente se expresa como

$$G(k, \omega) = \frac{Z}{\hbar\omega - E_{\text{pol}} - \frac{k^2}{2m^*} + \frac{i}{2\tau_k(\omega)}}, \quad (2.60)$$

donde

$$\frac{k^2}{2m^*} = Z k^2 \left(\frac{1}{2m} + \frac{\partial}{\partial k^2} \text{Re}[\Sigma(k, E_{\text{pol}})] \Big|_{k^2=0} \right), \quad (2.61)$$

siendo m^* la **masa efectiva** del polarón, y

$$\frac{1}{\tau_k(\omega)} = -2Z \text{Im}[\Sigma(k, \omega)], \quad (2.62)$$

siendo $\tau_k(\omega)$ el **tiempo de vida** del polarón. Ésto último se puede apreciar relacionando las ecuaciones (2.44), (2.34) y (2.43), obteniendo

$$G(k, \omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' A(\omega') e^{-i\omega't} \Theta(t),$$

probando evaluarlo con las definiciones dadas de (2.60)

$$G(k, t) = -i2\pi\Theta(t) Z e^{-iE_{\text{pol}}t/\hbar} e^{ik^2/2\hbar m^*} e^{-t/2\tau_k(E_{\text{pol}})}, \quad (2.63)$$

en donde se ve un decaimiento en la función de Green descrito por el tiempo de vida $\tau_k(E_{\text{pol}})$ del polarón.

Finalmente, como la función de Green se relaciona con operador de evolución $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ mediante

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \hat{U}(t) e^{i\varepsilon t} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} i\hbar (\hbar\omega - \hat{H} + i\varepsilon)^{-1} = iG(\omega)$$

así para cuando $\varepsilon \rightarrow 0^+$ la función de Green también otorgará la tasa de probabilidad de transición, de forma que, para el espacio temporal

$$W_{a \rightarrow b}(t) = |\langle a | iG(k, t) | b \rangle|^2 \sim e^{-t/\tau(E_{\text{pol}})}, \quad (2.64)$$

donde se ve claramente que la tasa de probabilidad de transición decae con el tiempo.

2.4. Matriz T

Se inicia el estudio de la **dispersión LS**, donde dos partículas interactúan mediante un potencial $\hat{V} = \hat{V}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, que solo depende de las coordenadas relativas $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ entre tales partículas. Sea el Hamiltoniano total

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (\text{desde coordenadas relativas}) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m_r} + \hat{V}, \quad m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2},\end{aligned}$$

con m_r como la masa reducida de las partículas dispersantes. Si la separación entre las partículas es tan grande que el potencial de interacción puede despreciarse, entonces se tendrá el hamiltoniano para una partícula libre

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (\text{sin interacción}) \Rightarrow (E - \hat{H}_0)|\phi\rangle = 0.$$

En esta región, la función de onda es una superposición entre el estado dado por la onda plana entrante con momentum relativo \mathbf{k} y el estado dispersado con momentum relativo \mathbf{k}' . Por la interacción se tiene un nuevo estado $|\Psi\rangle$, y como estamos interesados en procesos de dispersión elásticos, la energía se conserva

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \Rightarrow (E - \hat{H}_0 - \hat{V})|\Psi\rangle = (E - \hat{H}_0)|\phi\rangle,$$

pasando a la inversa

$$|\phi\rangle = |\Psi\rangle - \frac{\hat{V}}{E - \hat{H}_0}|\Psi\rangle \Rightarrow |\Psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{\hat{V}}{E - \hat{H}_0}|\Psi\rangle$$

(es una operación recursiva de **Lippmann-Schwinger**[44]).

En la teoría de dispersión existe una cantidad relevante llamada **amplitud de dispersión**, la cual es la amplitud de probabilidad para el estado inicial dado por la onda plana con momentum relativo \mathbf{k} de ser dispersado dentro de una onda circular con momentum relativo \mathbf{k}' (para el caso en dos dimensiones), y en el límite asintótico ($r \rightarrow \infty$), cuando la

distancia entre partículas es mucho mayor que su rango de interacción, la función de onda $|\Psi\rangle$ tiene la forma de la suma de la onda plana entrante más la onda circular saliente [18,55]

$$\langle r|\Psi\rangle = e^{iqr} - f_q \sqrt{\frac{i}{8\pi qr}} e^{iqr}. \quad (2.65)$$

Ahora, en lugar de tratar explícitamente con los estados de dispersión $|\Psi\rangle$, es posible resolver el problema de la dispersión de un modo más conveniente.

Desde las series de Born

Para empezar, se toma la definición de la función de Green sin interacción

$$G_0(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon},$$

y se aplica en la ecuación de Lippmann-Schwinger

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G_0 \hat{V} |\Psi\rangle \Rightarrow |\Psi\rangle = (1 - G_0 \hat{V})^{-1} |\phi\rangle,$$

además, usando la propiedad de serie geométrica para una razón pequeña

$$\frac{1}{1-z} = 1 + z + z^2 + z^3 + \dots,$$

entonces se tendrá la **serie de Born** [47]

$$|\Psi\rangle = (1 + G_0 \hat{V} + G_0 \hat{V} G_0 \hat{V} + \dots) |\phi\rangle. \quad (2.66)$$

Basándonos en nuestra interpretación de integrales de caminos, se ve que cada término contiene al menos un “evento de dispersión”. Para cada término, la onda dispersada se propagó libremente desde el último punto de dispersión hasta el observador. Esta propagación libre se puede factorizar usando (2.66) mediante $|\Psi\rangle = |\phi\rangle + |\Psi\rangle_s$, siendo así

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G_0 (\hat{V} + \hat{V} G_0 \hat{V} + \hat{V} G_0 \hat{V} G_0 \hat{V} + \dots) |\phi\rangle,$$

entonces, la sumatoria entre paréntesis es el historial de todas las formas posibles en las que la partícula podría haber llegado a la ubicación en la que se da la dispersión al final

[16]. Condensando esta expresión en el operador \hat{T} y la llamamos **matriz de transición** o matriz T ,

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G_0\hat{T}|\phi\rangle,$$

usando la ecuación modificada de Lippmann-Schwinger (aprovechando nuevamente las series geométricas)

$$\hat{T}|\phi\rangle = \hat{V}(1 - G_0\hat{V})^{-1}|\phi\rangle = \hat{V}|\Psi\rangle,$$

y de esto, también se tiene

$$\begin{aligned}\hat{T}|\phi\rangle &= \hat{V}|\Psi\rangle \\ &= \hat{V}|\phi\rangle + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0}\underbrace{\hat{V}|\Psi\rangle}_{\hat{T}|\phi\rangle}, \\ \hat{T} &= \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E - \hat{H}_0}\hat{T},\end{aligned}$$

así se ve que la ecuación de Lippmann-Schwinger se puede resolver iterativamente

$$|\Psi\rangle = (1 + GV)|\phi\rangle = (1 + G_0T)|\phi\rangle,$$

aplicando $\langle r|$ en ambos lados, tomando $|\phi\rangle = |q\rangle$

$$\begin{aligned}\langle r|\Psi\rangle &= \langle r|q\rangle + \langle r|G_0T|q\rangle \\ &= \langle r|q\rangle + \langle r|G_0|r=0\rangle\langle r=0|T|q\rangle,\end{aligned}$$

donde se puede hacer

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle r|G_0|r=0\rangle = -\frac{m}{\hbar^2}\sqrt{\frac{i}{8\pi qr}}e^{iqr},$$

finalmente se ve que

$$\begin{aligned}\langle r|\Psi\rangle &= e^{iqr} - \left(\frac{m}{\hbar^2}\sqrt{\frac{i}{8\pi qr}}e^{iqr}\right)\langle r=0|T|q\rangle \\ &= e^{iqr} - \sqrt{\frac{i}{8\pi qr}}e^{iqr}\underbrace{\left[\frac{m}{\hbar^2}\langle r=0|T|q\rangle\right]}_{f_q}.\end{aligned}\tag{2.67}$$

Por otro lado, expandiendo la matriz T en serie de Born y considerando el primer término como $\hat{T}_0 = \hat{V}$

$$\begin{aligned}\hat{T}_1 &= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V}, \\ \hat{T}_2 &= \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} \\ &\quad \vdots\end{aligned}$$

para resolver el término enésimo, se propone al potencial de contacto $V(\vec{r}) = V_0 \delta(\vec{r})$, lo cual ayuda enormemente en los cálculos pues en el espacio de momentos se puede expresar como $V(\vec{k}) = V_0$, ya que la transformada de Fourier de la función de Dirac es la unidad, y además el hecho de que la interacción sea de contacto (independiente de k) en el espacio de momentos permite hacer la suma en términos de una suma geométrica [18]. Entonces, aplicando estados sobre \hat{T}_n se tiene

$$\langle r=0 | T_n | q \rangle = V_0 + V_0^2 \Pi(E) + V_0^3 \Pi^2(E) + \dots, \quad (2.68)$$

con $\Pi(E) = \sum_k \frac{1}{E - \hbar^2 k^2 / 2m_r}$, pero haciendo continuo, se tiene

$$\Pi(E) \rightarrow \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{E + i0^+ - \hbar^2 k^2 / 2m_r},$$

así

$$\langle r=0 | T_n | q \rangle \rightarrow \langle r=0 | T | q \rangle = \frac{V_0}{1 - V_0 \Pi(E)} = \left(\frac{1}{V_0} - \Pi(E) \right)^{-1},$$

de este modo

$$\langle r=0 | T | q \rangle = \left(\frac{1}{V_0} - \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{E + i0^+ - \hbar^2 k^2 / 2m_r} \right)^{-1},$$

aplicando en (2.65)

$$f_q = \frac{m}{\hbar^2} \left[\left(\frac{1}{V_0} - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{1}{E + i\epsilon^+ - \hbar^2 k^2 / 2m_r} \right)^{-1} \right], \quad (2.69)$$

haciendo $E + i\epsilon = \hbar\omega$, y se introduce Λ^2 como una energía de corte (*cutoff* en inglés) para la interacción bosón - impureza, la cual se asume como la mayor energía que pueda medirse en el sistema. Entonces

$$\begin{aligned}\Pi(E) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_\Omega} dk \frac{k}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}} = -\frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \left[\ln(-2\hbar\omega m_r + \hbar^2 k^2) \Big|_0^{k_\Omega} \right] \\ &= \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \ln \left(\frac{-2m_r\hbar\omega}{-2m_r\hbar\omega + k_\Omega^2} \right) = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \ln \left(\frac{\hbar\omega}{\hbar\omega - \Lambda^2} \right), \quad \Lambda^2 = k_\Omega^2/2m_r,\end{aligned}$$

tomando que $\Lambda^2 \gg \hbar\omega$, es decir que Λ^2 es mayor que cualquier energía del sistema,

$$\Pi(E) = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \ln \left(-\frac{2\hbar\omega m_r}{k_\Omega^2} \right) = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \ln \left(-\frac{\hbar\omega}{\Lambda^2} \right) = \Pi(\omega),$$

siendo

$$T(\omega) = \frac{V_0}{1 - V_0\Pi(\omega)} = \frac{1}{1/V_0 - \Pi(\omega)}.$$

Se define la **energía de enlace** E_b de modo que

$$\hbar\omega = E_b / \lim_{\hbar\omega \rightarrow E_b} T(\omega) \rightarrow \pm\infty, \quad (E_b \text{ es polo de } T(\omega))$$

de esto

$$\begin{aligned}\frac{1}{V_0} - \Pi(E_b) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{1}{V_0} &= \Pi(E_b) = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \ln \left(-\frac{2E_b m_r}{k_\Omega^2} \right),\end{aligned}$$

así, haciendo $\hbar = 1$

$$T(\omega) = \frac{1}{\frac{m_r}{2\pi} \ln \left(-\frac{2E_b m_r}{k_\Omega^2} \right) - \frac{m_r}{2\pi} \ln \left(-\frac{2\omega m_r}{k_\Omega^2} \right)} = \frac{2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln \left(\frac{E_b}{\omega} \right)},$$

hasta aquí $T(\omega)$ no depende de k_Ω , pero diverge en $\omega = E_b$.

Devolviendo a su forma

$$\boxed{T(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln \left(\frac{-|E_b|}{E + i\epsilon} \right)}}, \quad (2.70)$$

de esto, en (2.69)

$$f_q = \frac{-4}{\frac{1}{\pi} \ln\left(\left|\frac{E}{E_b}\right|\right) - iH(E)} = \frac{-4}{\frac{2}{\pi} \ln(ka_{2D}) - iH(E)}, \quad (2.71)$$

siendo a_{2D} la longitud de dispersión.

La matriz T describe físicamente el resultado de un proceso de colisión, en el que las partículas interactúan mecánico-cuánticamente un número arbitrario de veces, de modo que la matriz T suma todos los procesos de interacción elementales que tienen lugar durante la colisión.

Desde la Ecuación de Schrodinger

Por otro lado, sea la ecuación de Schrodinger en 2D [52]:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(r) = E\Psi(r), \quad (2.72)$$

donde $E = \hbar^2 k^2 / 2m_r$. Separando en coordenadas polares

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \Psi(r, \theta) \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Psi(r, \theta) \right) + k^2 \Psi - \frac{2m_r V(r)}{\hbar^2} \Psi(r, \theta) = 0, \quad (2.73)$$

haciendo separación de variables

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_l(r) T_l(\theta), \quad (2.74)$$

de esto, se ve que

$$\frac{d^2 T_l(\theta)}{d\theta^2} + l^2 T_l(\theta) = 0 \rightarrow T_l(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(l\theta), \quad (2.75)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR_l(r)}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{2m_r V}{\hbar^2} - \frac{l^2}{r^2} \right) R_l(r) = 0, \quad (2.76)$$

si se hace $R_l(r) = u_l / \sqrt{r}$, se tiene

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m_r V}{\hbar^2} - \frac{(l^2 - 1/4)}{r^2} \right) u_l(r) = 0, \quad (2.77)$$

Es importante mencionar que para los gases ultrafríos se suele trabajar con ondas-s ($l = 0$) y con distancias muy largas entre partículas, por lo que la interacción entre ellas $V(r)$ tiende a cero, considerando esto para (2.77)

$$\frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} + \left(k^2 + \frac{l^2}{4r^2} \right) u_0(r) = 0, \quad (2.78)$$

se tiene

$$u_0(r) = A_0 \sqrt{r} [J_0(kr) \cos \delta_0 - N_0(kr) \sin \delta_0], \quad (2.79)$$

así

$$R_0(r) = \frac{u_0(r)}{\sqrt{r}} \propto A_0 [\cot \delta_0 J_0(kr) - N_0(kr)], \quad (2.80)$$

se define

$$\beta_l = \left(\frac{1}{R u_l(r)} \cdot \frac{d u_l(r)}{dr} \right)_{r=R^-}, \quad (2.81)$$

lo que implica para $l = 0$

$$\cot \delta_0(E) = \frac{x N_0'(x) - \beta_0 N_0(x)}{x J_0'(x) - \beta_0 J_0(x)}; \quad x = kR, \quad (2.82)$$

con $E \ll E_R = \frac{\hbar^2}{2m_r R^2}$ y $kR \ll 1$,

$$\begin{aligned} J_0(x) &= 1 + \mathcal{O}(x), \\ N_0(x) &= \frac{2}{\pi} \left(\ln \left(\frac{x e^\gamma}{2} \right) \right) + \mathcal{O}(x), \end{aligned} \quad (2.83)$$

con R como el alcance de la interacción y γ como la constante de Euler-Mascheroni [17].

Así

$$\cot \delta_0(E) = \frac{2}{\pi} \left(\ln \left(\frac{x e^\gamma}{2} \right) \right) + \mathcal{O}(x). \quad (2.84)$$

Ahora, resolviendo (2.77) de forma general

$$R_l(kr) = A_l' J_l(kr) + B_l' N_l(kr), \quad (2.85)$$

se tiene para el caso asintótico, por definición de las funciones de Bessel

$$R_l(kr) \rightarrow A_l(kr)^{-1/2} \cos \left(kr - \frac{\pi}{2} \left(l + \frac{1}{2} \right) + \delta_l \right), \quad (2.86)$$

junto a la ecuación (2.75), se tiene para (2.74) que

$$\Psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} A_l(kr)^{-1/2} \cos(kr - \frac{\pi}{2}(l + \frac{1}{2}) + \delta_l), \quad (2.87)$$

y como es posible expresar una onda plana en dos dimensiones como [51]

$$e^{ikx} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_l i^l \cos(l\theta) J_l(kr), \quad (2.88)$$

donde $\epsilon_0 = 1$ y $\epsilon_{l>0} = 2$, y como para el caso asintótico se tiene [53]

$$J_l(kr) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos(kr - \frac{\pi}{2}(l + \frac{1}{2})), \quad (2.89)$$

entonces, reemplazando (2.88) y (2.89) en (2.87) y comparándolo con (2.65) se tiene que

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_l i^l \cos(l\theta) \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos(kr - \frac{\pi}{2}(l + \frac{1}{2})) - f_q \sqrt{\frac{i}{8\pi kr}} e^{ikr} = \\ \sum_{l=0}^{\infty} A_l \sqrt{\frac{1}{kr}} \cos(l\theta) \cos(kr - \frac{\pi}{2}(l + \frac{1}{2}) + \delta_l). \end{aligned} \quad (2.90)$$

separando coeficientes de e^{ikr} y e^{-ikr} , se encuentra que

$$A_l = \epsilon_l i^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\delta_l}, \quad (2.91)$$

así, aplicando en (2.90) se tiene que

$$f_q = \sum_{l=0}^{\infty} \epsilon_l i^l \cos(l\theta) e^{-i\pi/2(l+1/2)} \left[\frac{-4\sqrt{i}}{\cot \delta_l - i} \right] = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(k), \quad (2.92)$$

así, para $l = 0$ y usando $e^{-i\pi/4} = \sqrt{-i}$, se tendrá

$$f_0(k) = \left[\frac{-4}{\cot \delta_0(E) - i} \right], \quad (2.93)$$

usando (2.84) [15] :

$$f_0(k) = \frac{-4}{\frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{k R e^\gamma}{2}\right) - i}, \quad (2.94)$$

comparando con (2.71) se tiene que

$$a_{2D} = \frac{R\epsilon^\gamma}{2}, \quad (2.95)$$

y de esto, la energía de enlace depende del alcance de interacción de la forma

$$E_b = -\frac{\hbar^2}{2m_r a_{2D}^2} = -\frac{4\hbar^2}{2m_r R^2 e^{2\gamma}}, \quad (2.96)$$

o de otro modo

$$E_b = 4E_R e^{-2\gamma}. \quad (2.97)$$

Así, de (2.84) se ve que es posible la relación

$$\cot\delta_0(E) = \frac{2}{\pi} \ln(ka_{2D}) + \mathcal{O}(kR), \quad (2.98)$$

y como

$$(ka_{2D})^2 = E/E_b, \quad (kR)^2 = E/E_R,$$

se puede ver que

$$\cot\delta_0(E) = \frac{1}{\pi} \ln(E/E_b) + \mathcal{O}(E/E_R), \quad (2.99)$$

y de (2.69) se concluye que la amplitud adimensional de dispersión se expresa como

$$f_q = \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle r=0 | T | q \rangle, \quad (2.100)$$

lo cual también puede expresarse como [18]

$$f(\mathbf{k}) = \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}_i | T(\hbar^2 k^2 / 2m_r) | \mathbf{k}_f \rangle, \quad (2.101)$$

así se ve que los elementos de la matriz T están directamente relacionados con la amplitud de dispersión, ya que la amplitud de dispersión es la transformada de Fourier de la matriz T. En resumen, la matriz T describe el campo dispersado en todo el espacio, incluso dentro de la región de interacción. Por lo tanto, la transformada de Fourier de la matriz T describe el mismo campo dispersado en el espacio de momentos. La amplitud de dispersión, por otro

lado, solo describe el campo dispersado en la región de campo lejano ($r \rightarrow \infty$), por lo que se entiende que los diferentes componentes del momento se separarían espacialmente, con el resultado de que la amplitud de dispersión debería reflejar la transformada de Fourier del campo dispersado. En otras palabras, solo el componente de amplitud total correspondiente a un valor particular \mathbf{k} llegará a un observador ubicado en la dirección \mathbf{k} [16].

Así, usando (2.94) y (2.101) es posible llegar a una expresión para la matriz T de una onda-s a bajas energías, dada por [17]

$$T^{-1}(0) = \frac{m_r}{2\hbar^2} \left[\frac{1}{\pi} \ln \left(\frac{E_b}{E} \right) + i \right], \quad (2.102)$$

que justamente viene a ser lo obtenido en (2.69).

Habiendo llegado hasta aquí, ya se tienen las herramientas necesarias para abordar sistemas interactuantes de muchos cuerpos a bajas temperaturas.

Capítulo 3

DESARROLLO DEL TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

3.1. Construcción del Hamiltoniano de Frohlich

Antes de empezar a abordar el problema como tal, es necesario construir el hamiltoniano que se usará para encontrar los estados ligados del sistema, y como se trabaja con sistemas de muchos cuerpos, es necesario que tal hamiltoniano esté representado según la forma de la segunda cuantización [56].

Sea el operador hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_i U(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} V(r_i, r_j), \quad (3.1)$$

donde las energías del sistema están dadas por

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle, \quad (3.2)$$

además $\langle r|E\rangle = \psi(r)$ y podemos decir que \hat{H} tiene una base de estados propios $|\psi_\alpha\rangle$ que obedecen

$$\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle, \quad (3.3)$$

los cuales también cumplen $\langle r|\psi_\alpha\rangle = \psi_\alpha(r)$, $\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$ y permiten describir a un estado arbitrario como una combinación lineal de la forma $|\Psi\rangle = \sum_\alpha b_\alpha|\psi\rangle$.

Ahora, calculando el valor de expectación del hamiltoniano \hat{H} en un estado arbitrario $|\Psi\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle &= \langle\Psi|\hat{H}\hat{I}|\Psi\rangle = \int dr \langle\Psi|\hat{H}|r\rangle\langle r|\Psi\rangle \\ &= \int \int dr dr' \langle\Psi|r'\rangle\langle r'|\hat{H}|r\rangle\langle r|\Psi\rangle.\end{aligned}\tag{3.4}$$

donde se usó al operador identidad

$$\hat{I} = \int dr |r\rangle\langle r|.$$

tomando $r = r'$ y dando forma,

$$\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \int dr \underbrace{\Psi^*(r)\hat{H}\Psi(r)}_{\text{densidad hamiltoniana}}\tag{3.5}$$

Ahora, aplicando conceptos de segunda cuantización

$$\hat{\mathcal{H}} = \int dr \hat{\Psi}^\dagger(r)\hat{H}\hat{\Psi}(r),\tag{3.6}$$

y se redefinen a las funciones de estado como $\hat{\Psi}(r) = \sum_\alpha \hat{b}_\alpha \hat{\psi}_\alpha(r)$, donde \hat{b}_α es el operador de aniquilación aplicado al autoestado $|\psi_\alpha\rangle$, y \hat{b}_α^\dagger será el operador de creación aplicado al mismo autoestado.

Reemplazando en (3.6)

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \int dr \left[\sum_\alpha \psi^\dagger(r)\hat{b}_\alpha^\dagger \right] \hat{H} \left[\sum_\beta \hat{b}_\beta \hat{\psi}_\beta(r) \right] \\ &= \int dr \sum_{\alpha,\beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta \hat{\psi}_\alpha(r) E_\beta \hat{\psi}_\beta(r) \\ &= \sum_{\alpha,\beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta E_\beta \int dr \hat{\psi}_\alpha^\dagger(r) \hat{\psi}_\beta(r),\end{aligned}\tag{3.7}$$

donde se puede ver que

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \int dr \langle\psi_\alpha|r\rangle\langle r|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha,\beta},\tag{3.8}$$

entonces

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha, \beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta E_\beta \delta_{\alpha, \beta} = \sum_{\alpha} E_\alpha \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\alpha = \sum_{\alpha} E_\alpha \hat{n}_\alpha, \quad (3.9)$$

siendo \hat{n}_α el operador número de partículas que están en el estado $|\psi_\alpha\rangle$. Este resultado indica que cada “partícula” que ocupa el estado $|\psi_\alpha\rangle$ tiene energía E_α , y que cada vez que se añade una partícula al sistema en cierto estado, la cantidad de energía aumentará según sea E_α para cada estado, es decir según los números de ocupación del sistema, y según la naturaleza de la partícula, el valor de expectación de cada operador \hat{n}_α será

$$\langle \hat{n}_\alpha \rangle = \{0, 1\}, \quad \text{para un sistema de fermiones}$$

$$\langle \hat{n}_\alpha \rangle = \{0, 1, 2, 3, \dots\}, \quad \text{para un sistema de bosones}$$

Por otro lado, si tenemos un operador arbitrario que actúa sobre una sola partícula, la forma de abordar el problema es semejante a la ya vista

$$\hat{O} = \int dr \hat{\Psi}^\dagger(r) \hat{o}_1 \hat{\Psi}(r), \quad (3.10)$$

donde $\hat{o}_1 = \sum_\beta \hat{o} |\psi_\beta\rangle \langle \psi_\beta|$, es decir el operador es diagonalizable para ciertos estados $|\psi_\beta\rangle$, donde los autovalores son dados por $\hat{o} |\psi_\beta\rangle = o_\beta |\psi_\beta\rangle$.

Dando forma

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \int dr \left[\sum_{\alpha} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(r) \hat{b}^\dagger \right] \hat{o}_1 \left[\sum_{\gamma} \hat{b}_\gamma \hat{\psi}_\gamma(r) \right] \\ &= \sum_{\alpha, \gamma} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma \int dr \hat{\psi}_\alpha^\dagger(r) \hat{o}_1 \hat{\psi}_\alpha(r) = \sum_{\alpha, \gamma} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma \int dr \langle \psi_\alpha | r \rangle \hat{o}_1 \langle r | \psi_\gamma \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \gamma} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma \langle \psi_\alpha | \hat{o}_1 | \psi_\gamma \rangle = \sum_{\alpha, \gamma, \beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma \langle \psi_\alpha | \hat{o} | \psi_\beta \rangle \langle \psi_\beta | \psi_\gamma \rangle \\ &= \sum_{\alpha, \gamma, \beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma o_\beta \langle \psi_\alpha | \psi_\beta \rangle \langle \psi_\beta | \psi_\gamma \rangle = \sum_{\alpha, \gamma, \beta} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\gamma o_\beta \delta_{\alpha, \beta} \delta_{\beta, \gamma} \\ &= \sum_{\alpha} o_\alpha \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\alpha, \end{aligned} \quad (3.11)$$

se ve que tiene una forma semejante a lo obtenido anteriormente.

Ahora, para el caso en el que hayan interacciones entre dos cuerpos en un sistema con muchas partículas, se tiene que

$$\begin{aligned}\hat{V}|r_1\rangle|r_2\rangle \dots |r_N\rangle &= \sum_{i=1} \sum_{i < j} V(r_i, r_j)|r_1\rangle|r_2\rangle \dots |r_N\rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} V(r_i, r_j)|r_1\rangle|r_2\rangle \dots |r_N\rangle,\end{aligned}\tag{3.12}$$

y si hacemos el cambio de notación $|r_1\rangle|r_2\rangle \dots |r_N\rangle = |r_1, r_2, \dots, r_N\rangle$ y $\hat{\psi}(r) = \hat{b}(r)$, entonces aplicando sobre cierto estado

$$\begin{aligned}\hat{b}^\dagger(r)\hat{b}^\dagger(r')\hat{b}(r')\hat{b}(r)|r_1, r_2, \dots, r_N\rangle &= \hat{b}^\dagger(r)\hat{b}^\dagger(r')\hat{b}(r')\hat{b}(r) \left[\hat{b}^\dagger(r_1) \dots \hat{b}^\dagger(r_1) \right] |0\rangle \\ &= \sum_{i=1} P^{n-1} \delta(r - r_i) \hat{b}^\dagger(r_n) \hat{b}^\dagger(r') \hat{b}(r') \left[\hat{b}^\dagger(r_1) \dots \hat{b}^\dagger(r_{n-1}) \hat{b}^\dagger(r_{n+1}) \dots \hat{b}^\dagger(r_1) \right] |0\rangle \\ &= \sum_{i=1} P^{n-1} \delta(r - r_n) \sum_{j \neq i} \delta(r' - r_m) \hat{b}^\dagger(r_n) \left[\hat{b}^\dagger(r_1) \dots \hat{b}^\dagger(r_{n-1}) \hat{b}^\dagger(r_{n+1}) \dots \hat{b}^\dagger(r_1) \right] |0\rangle \\ &= \sum_{i,j \neq i} \delta(r - r_i) \delta(r - r_j) |r_1, r_2, \dots, r_N\rangle,\end{aligned}\tag{3.13}$$

donde P es el signo que se relaciona con una permutación de términos ($P = 1$ si son bosones y $P = -1$ para fermiones), multiplicando $V(r, r')$ por ambos lados e integrando sobre r y r' obtendríamos

$$\frac{1}{2} \int \int dr dr' \hat{b}^\dagger(r) \hat{b}^\dagger(r') V(r, r') \hat{b}(r) \hat{b}(r') = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} V(r_i, r_j),$$

por lo que, podemos asignar al operador potencial \hat{V} la forma

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int \int dr dr' \hat{\Psi}^\dagger(r) \hat{\Psi}^\dagger(r') \hat{V}(r, r') \hat{\Psi}(r) \hat{\Psi}(r'),\tag{3.14}$$

siguiendo el mismo camino trazado para el caso de 1 partícula

$$\begin{aligned}\hat{V} &= \frac{1}{2} \int \int dr dr' \left[\sum_{\alpha} \hat{b}_{\alpha}^\dagger \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger \right] \left[\sum_{\beta} \hat{b}_{\beta}^\dagger \hat{\psi}_{\beta}^\dagger \right] \hat{V}(r, r') \left[\sum_{\gamma} \hat{\psi}_{\gamma} \hat{b}_{\gamma} \right] \left[\sum_{\epsilon} \hat{\psi}_{\epsilon} \hat{b}_{\epsilon} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} \hat{b}_{\alpha}^\dagger \hat{b}_{\beta}^\dagger \hat{b}_{\gamma} \hat{b}_{\epsilon} \int \int dr dr' \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger(r) \hat{\psi}_{\beta}^\dagger(r') \hat{V}(r, r') \hat{\psi}_{\gamma}(r') \hat{\psi}_{\epsilon}(r),\end{aligned}\tag{3.15}$$

la integral puede expresarse como

$$\int \int dr dr' \langle \psi_\alpha | r \rangle \langle \psi_\beta | r' \rangle \hat{V} \langle r' | \psi_\gamma \rangle \langle r | \psi_\epsilon \rangle = \int \int dr dr' \langle \psi_\alpha, \psi_\beta | r, r' \rangle \hat{V} \langle r', r | \psi_\gamma, \psi_\epsilon \rangle = \langle \psi_\alpha, \psi_\beta | \hat{V} | \psi_\gamma, \psi_\epsilon \rangle, \quad (3.16)$$

haciendo

$$\hat{V} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} V_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} |\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle \langle \psi_\gamma, \psi_\epsilon|, \quad (3.17)$$

finalmente se llegará a

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} V_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\gamma \hat{b}_\epsilon, \quad (3.18)$$

por lo que al expresar el hamiltoniano con interacción en el formato de segunda cuantización tendrá la forma

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} (E_\alpha^c + U_c(r_\alpha)) \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} V_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\gamma \hat{b}_\epsilon, \quad (3.19)$$

donde E_α^c es la energía cinética de la partícula y U_c es el potencial externo aplicado sobre el sistema percibido por cada partícula.

Es debido a la forma integral del potencial de interacción que se puede ver que las unidades de $V_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon}$ es energía/ m^D , siendo D la dimensión en la que se trata el sistema, por lo que si tenemos un sistema bidimensional entonces las unidades serán energía/ m^2 , así, en caso que se pueda considerar $V_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} = V_{bb}/A$ como la interacción entre las partículas creadas mediante \hat{b}^\dagger . Suponiendo que hayan más de un tipo de partículas interactuando en el sistema, las cuales puede denotarse por \hat{c}^\dagger y \hat{c} como los operadores de creación y aniquilación, respectivamente, y éstas no interactúan entre sí, pero sí interactúan con las primeras partículas con un factor de V_{bc}/A , entonces el factor 1/2 es omitido del término de interacción para este caso, y despreciando cualquier potencial externo al sistema, el nuevo hamiltoniano tendrá la forma

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_\alpha^c \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha + \sum_{\alpha} E_\alpha^b \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\alpha + \frac{V_{bb}}{2A} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{b}_\beta^\dagger \hat{b}_\gamma \hat{b}_\epsilon + \frac{V_{bc}}{A} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \epsilon} \hat{b}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\gamma \hat{b}_\epsilon, \quad (3.20)$$

donde E_α^c representa a la energía cinética de la partícula nueva. Para el caso de interacciones a bajas temperaturas, consideramos que tras cada dispersión el momentum neto se conserva [41], si denotamos el momentum lineal de las partículas dispersadas como k, k' y q como el momentum lineal que las partículas intercambian tras la colisión, entonces finalmente el hamiltoniano podrá expresarse como

$$\hat{H} = \sum_k E_k^c \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \sum_k E_k^b \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{V_{bb}}{2A} \sum_{k,k',q} \hat{b}_{k+q}^\dagger \hat{b}_{k'-q}^\dagger \hat{b}_{k'} \hat{b}_k + \frac{V_{bc}}{A} \sum_{k,k',q} \hat{b}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'-q}^\dagger \hat{c}_{k'} \hat{b}_k, \quad (3.21)$$

habiendo seguido todos estos pasos, obtuvimos el hamiltoniano que será usado para estudiar un sistema bidimensional de bosones con impurezas.

3.2. Obtención de la energía del polarón

A partir de este punto, se hará la consideración de unidades naturales $\hbar = 1$.

Sea el sistema en cuestión a estudiar con un Hamiltoniano

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_k \varepsilon_k^B b_k^\dagger b_k}_{\text{energía de los bosones}} + \underbrace{\sum_k \varepsilon_k^I c_k^\dagger c_k}_{\text{energía de las impurezas}} + \underbrace{\frac{g_{BB}}{2A} \sum_{k,k',q} b_{k+q}^\dagger b_{k'-q}^\dagger b_{k'} b_k}_{\text{interacción pequeña entre bosones (para usar la teoría de Bogoliubov)}} + \underbrace{\frac{g_{IB}}{A} \sum_{k,k',q} b_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'} b_k}_{\text{interacción bosón-impurezas}}, \quad (3.22)$$

donde g_{BB} es la energía de interacción entre los bosones, g_{IB} es la interacción entre los bosones y las impurezas, la cual puede ser arbitrariamente grande, ε_k^B es la energía cinética del bosón con momentum lineal k cuyos operadores de creación y aniquilación son \hat{b}_k^\dagger y \hat{b}_k , y ε_k^I es la energía cinética de la impureza, cuyos operadores de creación y aniquilación son \hat{c}_k^\dagger y \hat{c}_k . Sea el tiempo $t = 0$, se crea una impureza con momento \vec{k} y masa m_I , lo cual puede verse como $|\Psi(0)\rangle = c_k^\dagger |\text{BEC}\rangle$, siendo $|\text{BEC}\rangle$ la función de estado de un condensado de Bose-Einstein que, para nuestro propósito, obedece la teoría de Bogoliubov para interacciones débiles entre bosones [39].

La evolución en el tiempo de este estado es

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} c_k^\dagger |\text{BEC}\rangle,$$

es decir, en el sistema de bosones se crea una impureza con momento lineal k , y se estudia la evolución de este nuevo sistema en el tiempo. Sea el traslape temporal (overlap) o proyección de estados dado por el elemento de matriz de dispersión S

$$\begin{aligned} S(t) &= \langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle = \langle \text{BEC} | \underbrace{c_k e^{-i\hat{H}t}}_{c_k(t)} c_k^\dagger | \text{BEC} \rangle \\ &= \langle \text{BEC} | c_k(t) c_k^\dagger | \text{BEC} \rangle. \end{aligned}$$

Por otro lado, si $g_{IB} = 0$, entonces los bosones y las impurezas no interactúan entre sí (están desacoplados) y la dinámica de $c_k(t)$ se ve mediante

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_k(t) = [c_k(t), \hat{H}] = \varepsilon_k^I c_k^\dagger$$

donde $c_k(t) = e^{-i\varepsilon_k^I t} c_k$. Así

$$\begin{aligned} S(t) &= \langle \text{BEC} | e^{-i\varepsilon_k^I t} c_k c_k^\dagger | \text{BEC} \rangle = e^{-i\varepsilon_k^I t} \langle \text{BEC} | c_k c_k^\dagger | \text{BEC} \rangle \\ &= e^{-i\varepsilon_k^I t} \langle \text{BEC} | I - \underbrace{c_k^\dagger c_k}_{=0; \text{ pues en un BEC no hay impurezas}} | \text{BEC} \rangle = e^{-i\varepsilon_k^I t} \langle \text{BEC} | \text{BEC} \rangle \end{aligned}$$

finalmente

$$\boxed{S(t) = e^{-i\varepsilon_k^I t}},$$

esto se da cuando $g_{IB} = 0$, así $|S(t)| = 1$ (su módulo no cambia). lo cual significa que en un ambiente sin interacción, el estado del sistema evoluciona adquiriendo una fase.

La función de Green en el espacio de frecuencias (para este caso se usa el propagador causal)

$$G^c(k, \omega) = G(k, \omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt [\Theta(t) \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle - \eta \Theta(-t) \langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle] e^{i\omega t},$$

y como $t > 0$

$$G(k, \omega) = -i \int_0^{\infty} dt \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle e^{i\omega t} = -i \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega - \varepsilon_k^I)t}.$$

la integral por sí misma no converge, por lo que se hace

$$S(t) = e^{-i\varepsilon_k^I t} \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0^+} (e^{-i(\varepsilon_k^I - i\eta)t}),$$

así

$$G(k, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon_k^I + i\eta} \right) \quad (\text{función ideal de la impureza, con } g_{IB} = 0),$$

La función espectral de $G(k, \omega)$ se define como

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(k, \omega) = \delta(\omega - \varepsilon_k^I).$$

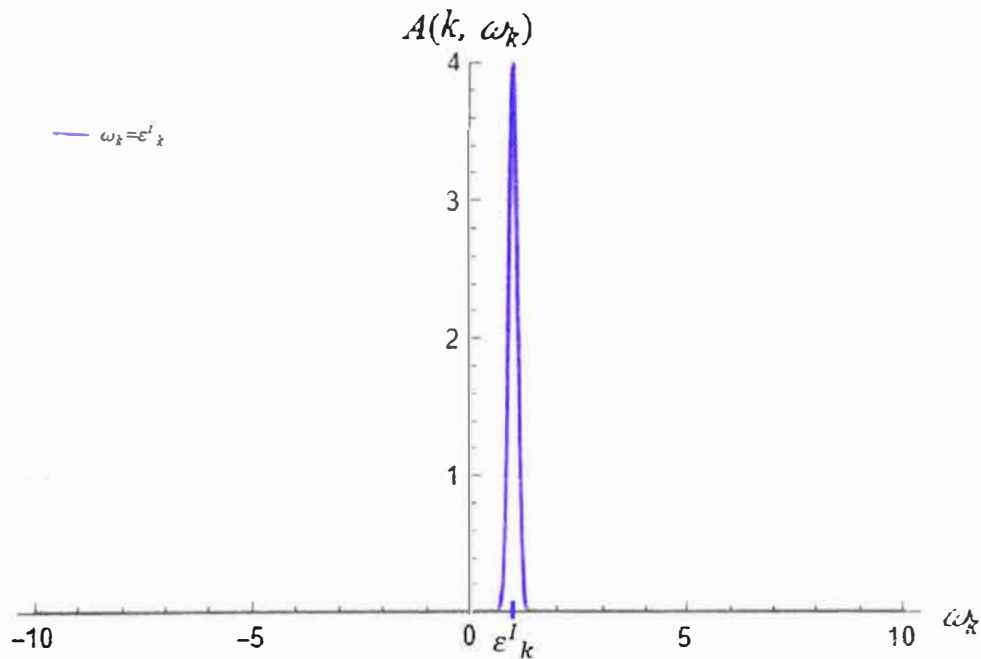


Figura 3.1: Función espectral de un sistema sin interacción

La impureza, al no interactuar con el BEC ($g_{IB} = 0$) mantiene su misma energía $\omega = \varepsilon_k^I$. Por lo que, para un **sistema no interactuante**, la función de Green de la impureza es

$$G(k, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega - \varepsilon_k^I + i\eta}. \quad (\text{Es la relación de dispersión de la impureza})$$

Por otro lado, cuando se analiza un **sistema con interacción** ($g_{IB} \neq 0$), se pueden intentar dos modos para llevar a cabo el análisis:

1. Se propone un ansatz para $|\Psi(t)\rangle$
2. Se usa la ecuación de Dyson con la función de Green

Se inicia con el punto 1.

Se considera que el sistema en su estado base se define por $|0\rangle = \hat{c}_{p=0}^\dagger |BEC\rangle$, es decir, tiene una impureza con momentum nulo. En ese sentido, debido al acoplamiento bosón - impureza, se tiene una corrección a la energía en el estado base, dada por $\langle GS | \hat{H}_{I-B} | GS \rangle = g_{IB} n_0$, que representa a la aproximación de campo medio del sistema. Por otro lado, si se considera un gas ideal haciendo $g_{BB} = 0$, se tiene la aproximación de Bogoliubov para bajas temperaturas $T \rightarrow 0$ K para el cuarto término de la ecuación (3.22)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{I-B} = & \frac{g_{IB}}{A} \sum_k (\sqrt{N_0})^2 \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \frac{g_{IB}}{A} \sum_{k,q} \sqrt{N_0} \hat{c}_{k+q}^\dagger \hat{c}_k (\hat{b}_q + \hat{b}_{-q}^\dagger) \\ & + \frac{g_{IB}}{A} \sum_{k,k',q} \hat{b}_{k+q}^\dagger \hat{c}_{k'-q}^\dagger \hat{c}_{k'} \hat{b}_k, \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde el primer término es el relacionado con la interacción de campo medio, el segundo término se relaciona con la interacción mediada entre bosones e impurezas (término de Frohlich) y el tercer término se da para energías mayores al del estado base ($k, k', q \neq 0$), se le denominará como el término más allá de Frohlich. Considerando que en un condensado de Bose-Einstein no hay fonones, se tiene que $\hat{\beta}_k |BEC\rangle = 0$, donde $\hat{\beta}_k$ aniquila un fonón de Bogoliubov de momento k , se propone un ansatz, tal que se considere la creación de fonones que no alteren el momento total del sistema, partiendo por separado los aportes del estado fundamental y las excitaciones elementales generadas por interacciones entre bosones e impurezas, todo aplicado sobre el condensado. Tal función de prueba es el ansatz

de Chevy [12]

$$|\Psi^{(p)}\rangle = \underbrace{\psi_0 \hat{c}_{p=0}^\dagger}_{\text{Estado base}} |BEC\rangle + \underbrace{\sum_q \phi_q \hat{c}_q^\dagger \hat{b}_{-q}^\dagger}_{\text{Excitaciones elementales}} |BEC\rangle, \quad (3.24)$$

factorizando

$$|\Psi^{(p)}\rangle = \left(\psi_0 \hat{c}_{p=0}^\dagger + \sum_q \phi_q \hat{c}_q^\dagger \hat{b}_{-q}^\dagger \right) |BEC\rangle. \quad (3.25)$$

Este ansatz es una función de onda expandida de muchos cuerpos con una impureza que emerge del mar de Fermi en términos del número de excitaciones partícula-hueco. Aplicando el principio variacional

$$\frac{\delta}{\delta \psi_0^*} \langle \Psi^{(p)} | \hat{H} - E | \Psi^{(p)} \rangle = 0, \quad \frac{\delta}{\delta \phi_q^*} \langle \Psi^{(p)} | \hat{H} - E | \Psi^{(p)} \rangle = 0, \quad (3.26)$$

aplicando la función (3.25) por partes, se tiene para el término sin interacción

$$\langle \Psi^{(p)} | \hat{H}_0 | \Psi^{(p)} \rangle = \sum_k |\phi_k|^2 \left(\epsilon_k^{(B)} - \epsilon_k^{(I)} \right).$$

para el término de Frohlich

$$\langle \Psi^{(p)} | \hat{H}_F | \Psi^{(p)} \rangle = g_{IB} \sqrt{\frac{n_0}{A}} \sum_q (\psi_0^* \phi_q + \psi_0 \phi_q^*),$$

para el término más allá de Frohlich

$$\langle \Psi^{(p)} | \hat{H}_{M-F} | \Psi^{(p)} \rangle = \frac{g_{IB}}{A} \sum_{p,q} \phi_{p+q}^* \phi_p.$$

Así, aprovechando los índices mudos p y q , se define

$$\begin{aligned} \tilde{E} = \langle \Psi^{(p)} | \hat{H} - E | \Psi^{(p)} \rangle &= \sum_q |\phi_q|^2 \left(\epsilon_q^{(B)} - \epsilon_q^{(I)} \right) + g_{IB} \sqrt{\frac{n_0}{A}} \sum_q (\psi_0^* \phi_q + \psi_0 \phi_q^*) \\ &+ \frac{g_{IB}}{A} \sum_{p,q} \phi_{p+q}^* \phi_p - E \underbrace{\left(\psi_0^* \psi_0 + \sum_q \phi_q^* \phi_q \right)}_{=1}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde el último término sirve como una restricción al sistema (multiplicador de Lagrange).

De este modo

$$\frac{\delta \tilde{E}}{\delta \psi_0^*} = g_{IB} \sqrt{\frac{n_0}{A}} \sum_q \phi_q - E \psi_0, \quad (3.28)$$

$$\frac{\delta \bar{E}}{\delta \phi_q^*} = \phi_q \left(\epsilon_q^{(B)} - \epsilon_q^{(I)} \right) + g_{IB} \sqrt{\frac{n_0}{A}} \psi_0 + \frac{g_{IB}}{A} \sum_q \phi_q - E \phi_q, \quad (3.29)$$

reescribiendo la sumatoria de la expresión anterior de la forma

$$\sum_q \phi_q = \chi_0 - \psi_0, \quad (3.30)$$

donde χ_0 es una función auxiliar, esto implica de (3.27) que (simplificando la notación $g_{IB} = g$)

$$\psi_0 = \frac{\chi_0 g \sqrt{n_0/A}}{E + g \sqrt{n_0/A}}, \quad (3.31)$$

y de (3.29) que

$$\phi_q \left(\epsilon_q^{(B)} - \epsilon_q^{(I)} - E \right) + g_{IB} \sqrt{\frac{n_0}{A}} \left(\frac{\chi_0 g \sqrt{n_0/A}}{E + g \sqrt{n_0/A}} \right) + \frac{g_{IB}}{A} \left(\frac{\chi_0 g \sqrt{n_0/A}}{E + g \sqrt{n_0/A}} \right) = 0, \quad (3.32)$$

acomodando en función de las sumatorias

$$\phi_q = \frac{\chi_0}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}} \left[\frac{1}{E + g \sqrt{n_0/A}} \cdot \frac{g}{A} \cdot (gn_0 + E) \right], \quad (3.33)$$

aplicando sumatoria sobre todos los valores de q en ambos lados y usando (3.30) se tiene que

$$E = n_0 g \left(\frac{\frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}}}{1 - \frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}}} \right), \quad (3.34)$$

si ahora se decide agregar el aporte que genera la interacción de campo medio, se tendrá la energía de la cuasipartícula E_p , dada por

$$E_p = n_0 g + n_0 g \left(\frac{\frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}}}{1 - \frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}}} \right), \quad (3.35)$$

acomodando

$$E_p = \frac{n_0 g}{1 - \frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{E - \epsilon_q^{(B)} + \epsilon_q^{(I)}}}, \quad (3.36)$$

separando la energía de la impureza $E_p \rightarrow \omega_k - \epsilon_k^{(I)}$, se tiene

$$\omega_k = \epsilon_k^{(I)} + \frac{n_0 g}{1 - \frac{g}{A} \sum_q \frac{1}{\omega_q - \epsilon_q^{(B)}}}, \quad (3.37)$$

se ve que el segundo término de la derecha de (3.37) es la energía adicional que la impureza adquiere al interactuar con su entorno, es la **autoenergía**, de lo ya desarrollado anteriormente hasta la ecuación (2.57) se ve que es posible denotar esta expresión como

$$\boxed{\omega_k = \epsilon_k^{(I)} + n_0 \text{Re}[T(\vec{0}, \omega_k)]}, \quad (3.38)$$

a este punto se aprecia que, en contraste al escenario inicial, la energía de la cuasipartícula ya no solo se ve influenciada por la interacción del campo medio, sino también por la energía de interacción del condensado de B-E. Es posible denotar este cambio mediante el diagrama de Feynman de la Fig. 3.2 para una interacción entre partículas distinguibles.

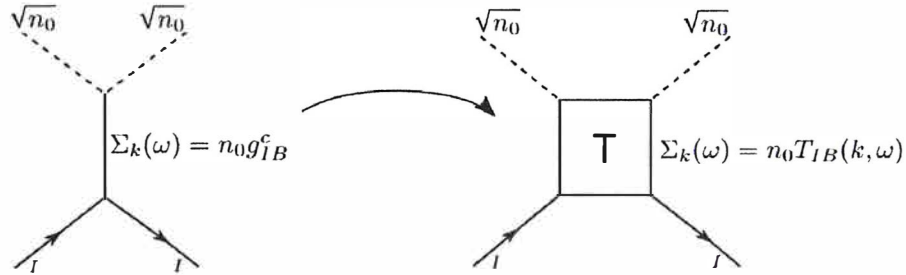


Figura 3.2: Diagramas de Feynman de las funciones de autoenergía a usar. [48]

Por un lado, revisando la función de onda de la cuasipartícula (3.25) se puede apreciar que la parte que ofrece mayor información sobre la cuasipartícula es el coeficiente del operador \hat{c}_0^\dagger , el cual se apega más al resultado que esperamos en el estado fundamental, obtenido mediante el residuo de la cuasipartícula $\sqrt{Z_0}$. Por otro lado, la sumatoria de coeficientes del segundo término de (3.25) expresa un continuo de excitaciones de la función espectral, visible en la Fig. 3.3.

Ahora, se considera el punto 2 para analizar el sistema con interacción. La forma esperada de la función de Green es dada por la ecuación de Dyson vista en (2.55)

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k^I - \Sigma_k(\omega)},$$

donde la autoenergía $\Sigma_k(\omega)$ es un término que depende de las interacciones, por lo que se entiende que si $g_{IB} \rightarrow 0 \Rightarrow \Sigma_k(\omega) \rightarrow 0$.

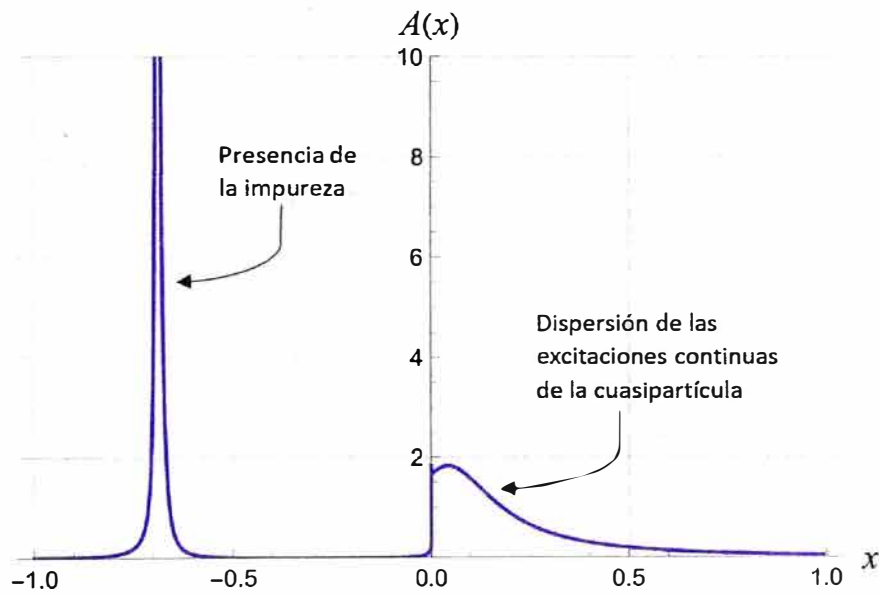


Figura 3.3: Gráfica de la función espectral para un caso particular de energía de enlace E_b .

Buscando la energía de la cuasipartícula (polarón) mediante un polo de $G(k, \omega)$, se hace

$$\omega_k - \varepsilon_k^I - \Sigma_k(\omega) = 0 \Rightarrow \boxed{\omega_k = \varepsilon_k^I + \text{Re}(\Sigma_k(\omega_k))},$$

es la energía de la cuasipartícula, presentada mediante una ecuación autoconsistente.

Así, si $g_{IB} = 0$, entonces $\omega = \varepsilon_k^I$; es decir, la energía de la cuasipartícula sería la misma que la de la impureza.

3.3. Funciones posibles para la autoenergía

Interacción de campo medio

Ofrece una función de autoenergía que no depende de ω , dada por

$$\Sigma_k(\omega) = n_0 g_{IB}$$

sin embargo, al aplicar en la función de Green $G_k(\omega)$

$$\begin{aligned} G_{\text{campo medio}}(k, \omega) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{1}{\omega_k - \varepsilon_k^I - n_0 g_{IB} + i\eta} \right) \\ &= \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_k - \varepsilon_k^I - n_0 g_{IB}} \right) + i \underbrace{[-\pi \delta(\omega_k - \varepsilon_k^I - n_0 g_{IB})]}_{\text{Im}G_k(\omega)}. \end{aligned}$$

entonces la función espectral será

$$\begin{aligned} A(k, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(k, \omega) \\ &= \delta(\omega_k - \varepsilon_k^I - n_0 g_{IB}) \end{aligned}$$

lo que significa que el polo se mueve de lugar, entonces la energía de la cuasipartícula será

$$\boxed{\omega_k = \varepsilon_k^I + n_0 g_{IB}}$$

tal como se puede apreciar en la Fig. 3.4.

Interacción de Frohlich

Por otro lado, si para la autoenergía se usa $\Sigma_k(\omega) = n_0 T_{IB}(k, \omega)$, donde $T_{IB}(k, \omega)$ es la matriz T de interacción impureza-bosón que se hizo mención en las relaciones (2.69) y (3.38). Ésta función de autoenergía tiene la forma

$$\Sigma_k(\omega) = \frac{n_0 2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln \left(-\frac{|E_b|}{\omega} \right)},$$

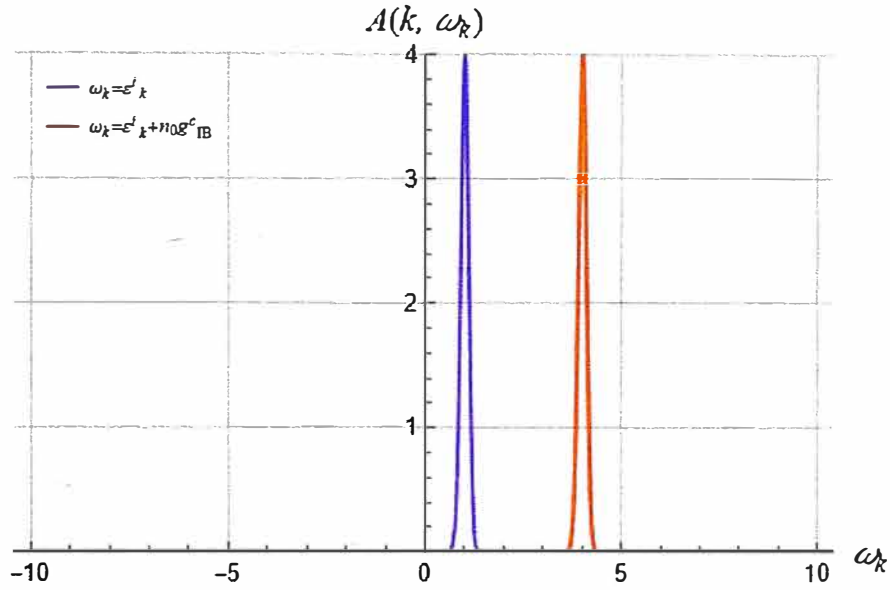


Figura 3.4: función espectral para una función de autoenergía constante.

por lo que se ve lo siguiente: Si no hubieran interacciones, una impureza con $\vec{k} = \vec{0}$ tendría

$$G_0(\vec{0}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k=0}^I + i\epsilon},$$

y ahora para la función de Green con interacción se añade el término $\Sigma(\vec{0}, \omega)$, la función tendría la forma

$$G(\vec{k} = \vec{0}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{k=0}^I - \Sigma_{k=0}(\omega) + i\epsilon},$$

entonces la forma que se tendrá usando la matriz T de interacción será

$$G(\vec{k} = \vec{0}, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{n_0 2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln\left(-\frac{|E_b|}{\omega}\right)}}$$

usando la continuación analítica se tiene que

$$G(\vec{k} = \vec{0}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega - \frac{n_0 2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln\left(-\frac{|E_b|}{\omega + i\epsilon}\right)}}$$

para poder graficar el resultado, se hacen ciertas consideraciones, tales como mostrar el argumento del logaritmo en representación polar

$$\ln \left(-\frac{|E_b|}{\omega + i\epsilon} \right) = \ln \left(\left| -\frac{|E_b|}{\omega + i\epsilon} \right| \right) + i\theta,$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \ln \left(-\frac{|E_b|}{\omega + i\epsilon} \right) = \ln \left(\left| \frac{E_b}{\omega} \right| \right) + i\pi H(\omega),$$

donde θ es el argumento de la forma polar, y $H(\omega)$ es la función escalón de Heaviside, donde

$$H(\omega) = \begin{cases} 1, & \omega > 0 \\ 0, & \omega < 0 \end{cases}$$

así

$$G(\vec{k} = \vec{0}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\epsilon - \frac{n_0 2\pi}{m_r} \frac{1}{\ln \left(\left| \frac{E_b}{\omega} \right| \right) + i\pi H(\omega)}},$$

se ve que $T(\omega)$ no diverge si $\omega = -E_b > 0$, puesto que en este caso $H(\omega) = 1$, pero sí diverge cuando $\omega = -E_b < 0$, por lo que $T(\omega)$ tiene un polo para energías negativas.

3.4. Implementación numérica

Una consideración muy útil para graficar este resultado es uniformizando las unidades, para esto se definen los valores

$$E_n = \frac{k_n^2}{2m}; \quad k_n = \sqrt{4\pi^2 n_0}$$

donde las masas son $m_I = m = 2m_r$. Sea la función de Green

$$G(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega + i\epsilon - \Sigma(\omega)},$$

por E_n y haciendo $x = \omega/E_n$,

$$E_n G(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\frac{\omega + i\epsilon - \Sigma(\omega)}{E_n}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\epsilon - \frac{2}{\pi} \frac{1}{\ln \left(\left| \frac{1}{x} \cdot \left| \frac{E_b}{E_n} \right| \right) + i\pi H(x)}}$$

por otro lado, se define la energía de enlace $E_b = -\frac{1}{ma_{2D}^2}$ (siendo a_{2D} la longitud de dispersión de dos dimensiones). Con esto se tiene

$$\frac{E_b}{E_n} = -\frac{1}{ma_{2D}^2} \frac{2m}{k_n^2} = -\frac{2}{(k_n a_{2D})^2},$$

se define $\gamma = k_n a_{2D}$, y de esto $\alpha = \ln(\gamma)$, entonces $e^\alpha = \gamma$, $\frac{E_b}{E_n} = -\frac{2}{e^{2\alpha}}$, así

$$E_n G(\omega) = \bar{G}(x, \alpha) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[x + i\epsilon - \frac{2}{\pi} \frac{1}{\ln \left(\left| \frac{2}{e^{2\alpha}} \right| \cdot \frac{1}{|x|} \right) + i\pi H(x)} \right]^{-1}, \quad (3.39)$$

así se tendrá la función espectral

$$A(x, \alpha) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\bar{G}(x, \alpha)] \quad (3.40)$$

en las Fig. 3.5 y 3.6 se ven el código en Wolfram Mathematica y Python de la ecuación (3.40), respectivamente, donde las zonas rojas son los polos que representan los valores posibles para la cuasipartícula según sean los valores de la energía de enlace, dada implícitamente en $\alpha = \ln(k_n a_{2D})$.

```

T := (2/Pi) * (1 / (Log[Abs[2 / (Exp[2 + alpha] + x)] + 1 - Pi - HeavisideTheta[x]]))
G := 1 / (x - T + I * 0.05)
DensityPlot[-Im[G] / Pi, {alpha, -4, 4}, {x, -5, 2}, PlotRange -> {All, All, {0, 4}},
PlotPoints -> 200, ImageMargins -> 0, LabelStyle -> Directive[22, Black, FontFamily -> "Times New Roman"],
FrameLabel -> {Style["alpha", Italic, Black, 22, FontFamily -> "Times New Roman"], Style["x", Italic, Black, 22,
FontFamily -> "Times New Roman"]}, ImageSize -> 350, ColorFunction -> "TemperatureMap", ClippingStyle -> Automatic,
LabelStyle -> Directive[FontSize -> 22, Black, Italic, FontFamily -> "Times New Roman"], PlotLabel -> "A(x, alpha)",
AspectRatio -> 1, ImageMargins -> 0, PlotRangePadding -> 0, PlotLegends -> Automatic]

```

Figura 3.5: Código en Wolfram Mathematica de la gráfica de contorno de la función espectral.

Viéndolo de otro modo, la variable x habla de la energía de la cuasipartícula y α habla de la longitud de dispersión entre partículas del sistema. Y así, sea la función de autoenergía con unidades uniformizadas

$$\Sigma(x, \alpha) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{2}{\pi} \frac{1}{\ln \left(\frac{-2e^{-2\alpha}}{x + i\epsilon} \right)} \quad (3.41)$$

```

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import math
#definiendo la función escalón
def H(k, a):
    #k es la variable
    #a es el valor donde aparece el escalón
    H=np.zeros(len(k))
    for i in range(len(k)):
        if(k[i]<a):
            H[i]=0
        else:
            H[i]=1
    return H
#graficando la función escalón
i = 1j
e=np.e #2.718281828459045
p=np.pi #3.141592653589793
x1 = np.linspace(0,5,5000)
x2 = np.linspace(-5,0,5000)
def z2(x2,y):
    G = 1/(x2-(2/p)*(1/(np.log(abs(2*(np.exp(2*y)/x2)))))+0.001*i)
    ImG = G.imag
#sea la función espectral
return -ImG/p
alfa=np.linspace(-4,0.394,5000)
P=np.ones(len(alfa))
n=len(x2)
W=np.ones(len(alfa))
for j in range(len(alfa)):
    g=alfa[j]
    Z=z2(x2,g)
    T=Z
    T.sort()
    P[j]=T[n-2]
    Z=z2(x2,g)
for k in range(len(alfa)):
    contador=0
    index = 0
    g=alfa[k]
    Z=z2(x2,g)
    for q in range(len(Z)):
        if (P[k] == Z[q]):
            index =contador
        else:
            contador+=1
    W[k]=x2[index]

```

Figura 3.6: Código en Python para obtención de la gráfica para la rama atractiva (izquierda) y la rama repulsiva (derecha)

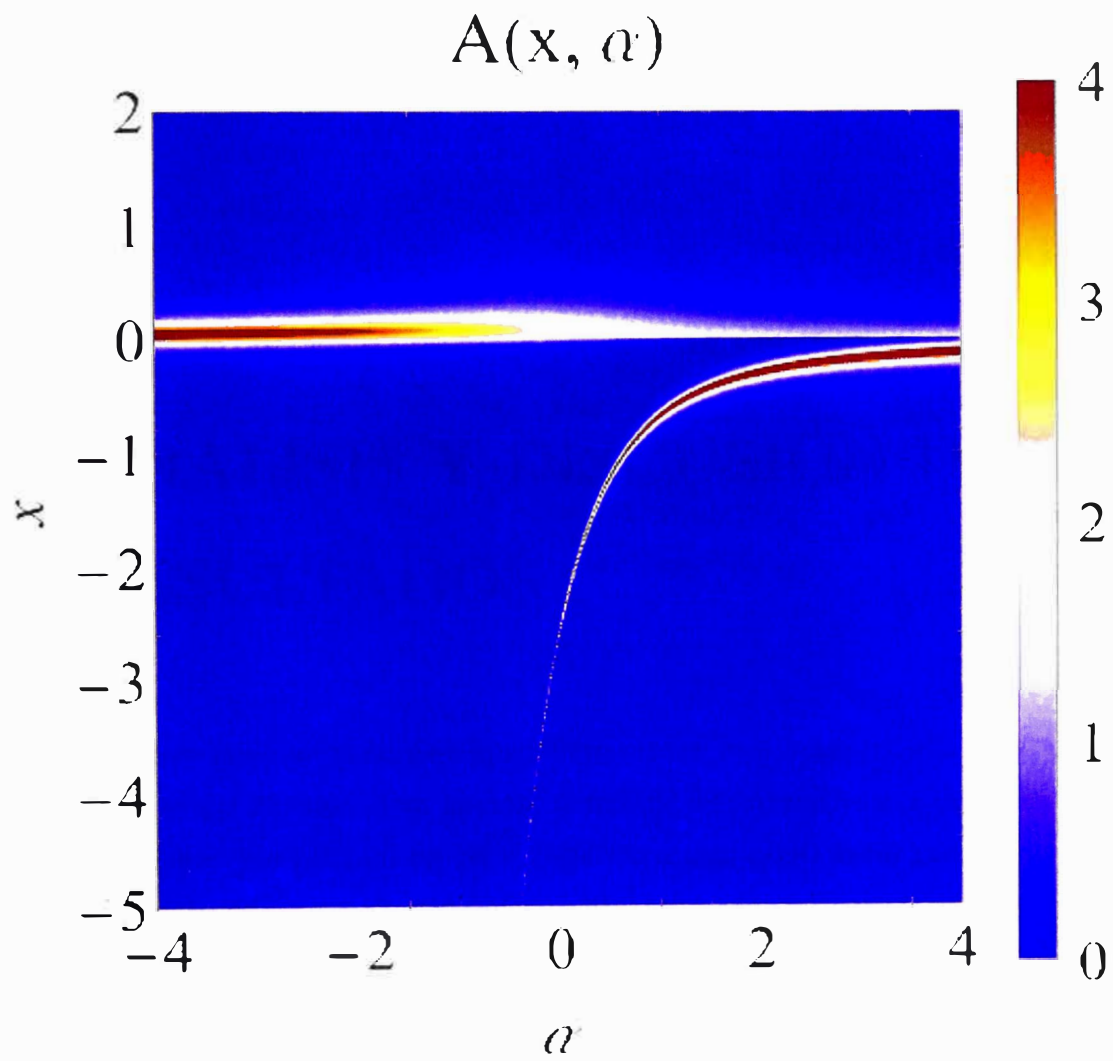


Figura 3.7: Gráfica de contorno de la función espectral dada en la ecuación (2.40).

Capítulo 4

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Ahora estudiamos las propiedades espectrales y de cuasipartícula de la impureza acoplada al gas de Bose. Tras graficar la función espectral notamos dos ramas polarónicas principales, una para valores de α negativos y otra para valores positivos. La rama para α positivas se conoce como el **polarón atractivo**, debido a que la energía de dicha cuasipartícula se desplaza hacia energías negativas como consecuencia de una atracción entre la impureza y los bosones.

Esta rama es dominante para $\alpha > 0$ sin embargo vemos que al reducir el valor de α el ancho de esta línea se atenúa y al cruzar el cero se vuelve casi invisible, en este caso, se dice que la rama al perder visibilidad **pierde peso espectral**.

Por otro lado, cuando α disminuye desde valores positivos a negativos, vemos que aparece peso espectral a energías positivas, este peso espectral es **incoherente**, en el sentido de que no forma ningún estado de cuasipartícula pues el peso espectral transferido al inicio es insuficiente, no obstante, al cruzar el origen, eventualmente el polarón atractivo pierde todo su peso espectral y se forma una nueva cuasipartícula bien definida.

Ahora, sabiendo que la función espectral nos da una información acerca de la distribución

del peso espectral del sistema, para caracterizar al sistema es útil como mencionamos usar la teoría de la cuasipartícula.

En la Fig. 4.1 mostramos más claramente las ramas polarónicas de la energía de las cuasipartículas en función de α .

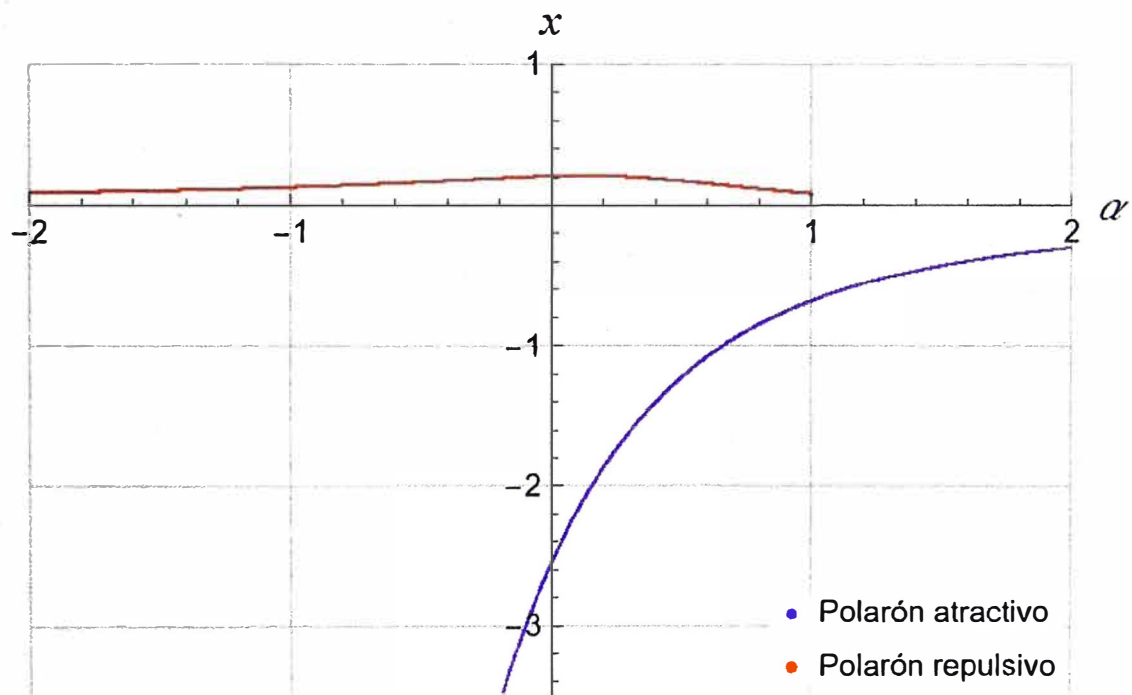


Figura 4.1: Gráfica de los valores de energía del polarón y energía de enlace que ofrecen polos a $A(k, \omega)$ en unidades uniformizadas.

Para graficar el tiempo de vida media y la tasa de decaimiento se usa (2.62), y así, en unidades uniformizadas se expresa como

$$\frac{1}{\tau(x, \alpha)} = -2Z(\alpha)\text{Im}[\Sigma(x, \alpha)], \quad (4.1)$$

para el residuo $Z(\alpha)$ se usa (3.41), de lo cual

$$Z(\alpha) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[1 - \frac{2}{\pi(x + i\varepsilon) \ln^2 \left| \frac{-2e^{2\alpha}}{x + i\varepsilon} \right|} \right]_{x=E_{pol}}^{-1} \quad (4.2)$$

En este caso, la posición de las ramas polarónicas corresponde a los picos de la función espectral en Fig. 3.7, lo que nos indica que efectivamente, la función espectral es máxima alrededor de los estados de cuasipartícula. En términos de energía, vemos que el polarón atractivo tiene un corrimiento de energía considerable para $\alpha < 0$, este corrimiento a la energía es consecuencia del fuerte acomplamiento con el estado molecular cuya energía E_b incrementa para $\alpha < 0$. A este estado se le conoce como *fuertemente interactuante* pues da lugar a cambios significativos en la energía de la cuasipartícula.

Por otra parte, la rama repulsiva solo se desprende ligeramente del origen, y no es resultado del acoplamiento directo con la molécula, sino una interacción *residual* que es mucho más débil. Ahora, podemos mirar que tanto peso espectral se distribuye entre las distintas cuasipartículas que aparecen en el sistema. En la Fig. 4.3 mostramos el valor del residuo de las dos ramas de polarón.

La rama atractiva aparece con la mayor parte del peso espectral para $\alpha > 0$ vemos que cuando α decrece, esta rama de polarón pierde residuo, esto es consistente con nuestro análisis previo de la función espectral, es decir, el ensanchamiento de la rama de polarón de la función espectral es consecuencia de una disminución del residuo de esta rama, es decir, al perder peso espectral, pierde residuo.

Por otro lado, la rama repulsiva absorbe todo el residuo para valores de α muy negativos, al cruzar cero pierde residuo y eventualmente es imposible definir una cuasipartícula para esta rama para valores positivos de α .

Para entender el porqué la rama repulsiva deja de existir para valores positivos de α es conveniente recurrir al tiempo de vida de la cuasipartícula y el ensanchamiento de la función espectral.

```

g2 = (2/Pi) * (1 / (Log[(-2 * Exp[2 * a2]) / (x2 + 0.1 * I)] ^ 2) / (x2 + 0.1 * I));
h2 = Re[1 / (1 - g2)];
r2 = {-a2, h2};
z2 = Transpose[r2];
ListPlot[z2,
  AxesLabel -> {Style["a", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"],
  Style["Z", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"]},
  GridLines -> Automatic, PlotLegends -> {"Polarón repulsivo"}, PlotStyle -> Thickness[.5]

```

Figura 4.2: Código en wolfram para el residuo del polarón repulsivo

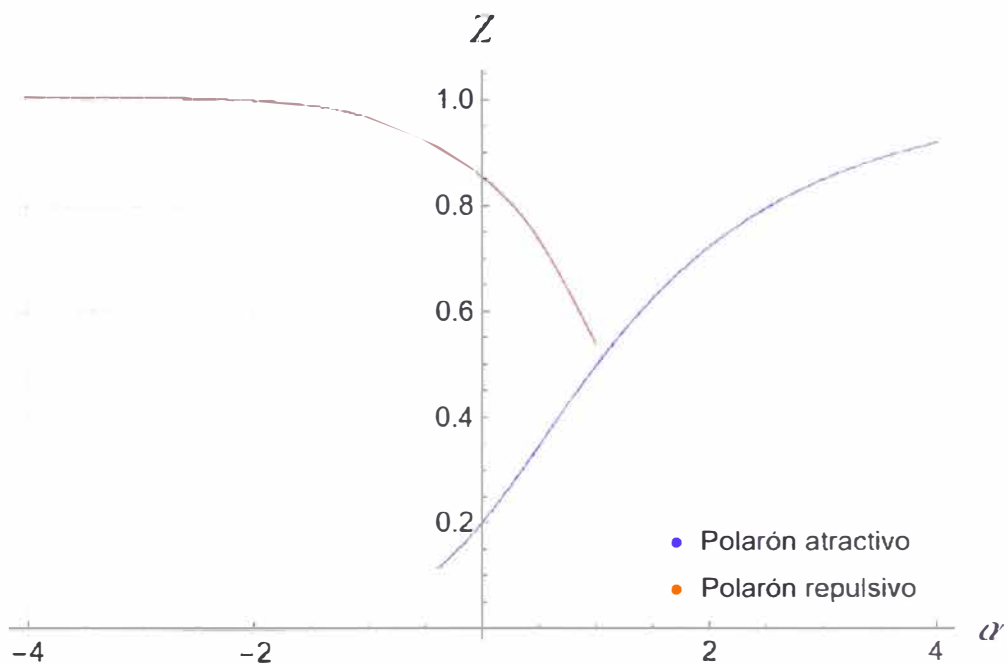


Figura 4.3: Gráfica de los residuos para ambas ramas, dada por la ecuación (4.2).

Por un lado, hay que recalcar que la rama atractiva está situada a energías negativas y es el estado base del sistema, por lo tanto no tiene asociado un decaimiento, es decir, no puede decaer pues no existen estados a los cuales pueda ser energéticamente favorable decaer, pues esta rama es ya el estado base.

Por otro lado, el polarón repulsivo si puede decaer, en Fig. 4.5 mostramos la tasa de decaimiento de la rama repulsiva como función de α , vemos que es una función creciente en α y corresponde al visible ensanchamiento de la función espectral en Fig 3.7.

El ensanchamiento de la función espectral determina directamente la vida de la cuasi-partícula, es una partícula con vida larga para valores grandes y negativos de α , mientras que su tiempo de vida se reduce dramáticamente para $\alpha \rightarrow 0^-$.

Cuando el ensanchamiento de la cuasipartícula se vuelve del orden de los corrimientos en la energía, se dice que la cuasipartícula deja de estar bien definida, pues es un estado que pierde coherencia, la cual esta asociada a polos reales de la función de Green, si la parte imaginaria domina, entonces decae más rápido que lo que oscila (ver Eq. 2.63).

```

σ2 = (2/Pi) * (1 / (Log[-2 * Exp[2 * a2] / (x2 + 0.1 * I)]));
      {número pi} {logaritmo} {exponencial} {número i}

tm2 = -2 * Im[σ2] * h2;
      {parte imaginaria}

tdv2 = 1 / tm2;

Tf = {-a2, tm2/2};

tg = Transpose[Tf];
      {transposición}

tdp = {-a2, tdv2};

tdp2 = Transpose[tdp];
      {transposición}

ListPlot[tg,
  {representación de lista}
  AxesLabel -> {Style["α", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"],
  {etiqueta de ejes} {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra}
  Style["Γ/En", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"]}, GridLines -> Automatic,
  {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra} {parrilla de líneas} {automático}
  PlotLegends -> {"Polarón repulsivo"}]
  {leyendas de representación}

```

Figura 4.4: Código en wolfram para la tasa de decaimiento del polarón repulsivo

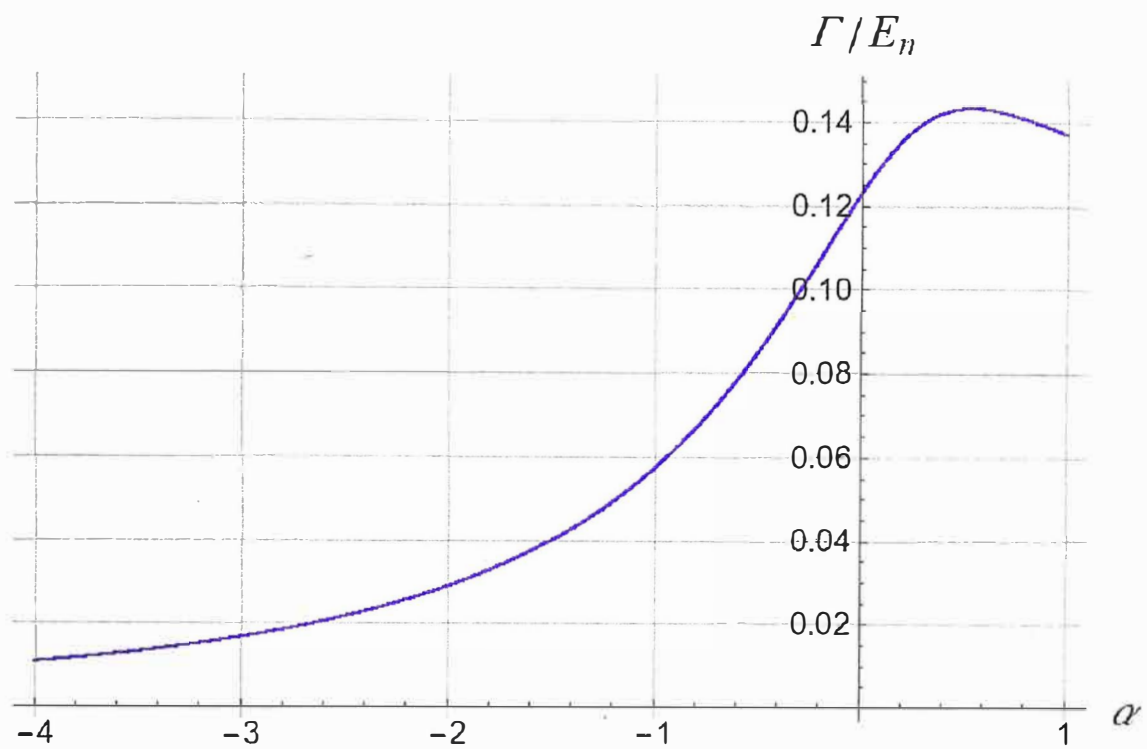


Figura 4.5: Tasa de decaimiento de vida del polarón repulsivo en función de α dado por (4.1).

```

ListPlot[tdp2,
  (*representación de lista*)
  AxesLabel -> {Style["α", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"],
  (*etiqueta de ejes*) (*estilo*) (*cursiva*) (*negro*) (*familia de tipo de letra*)
  Style["t / (E_n)^-1", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"]}, GridLines -> Automatic]
  (*estilo*) (*cursiva*) (*negro*) (*familia de tipo de letra*) (*parámetro de línea*) (*automático*)

```

Figura 4.6: Código en Wolfram para el tiempo de vida media del polarón

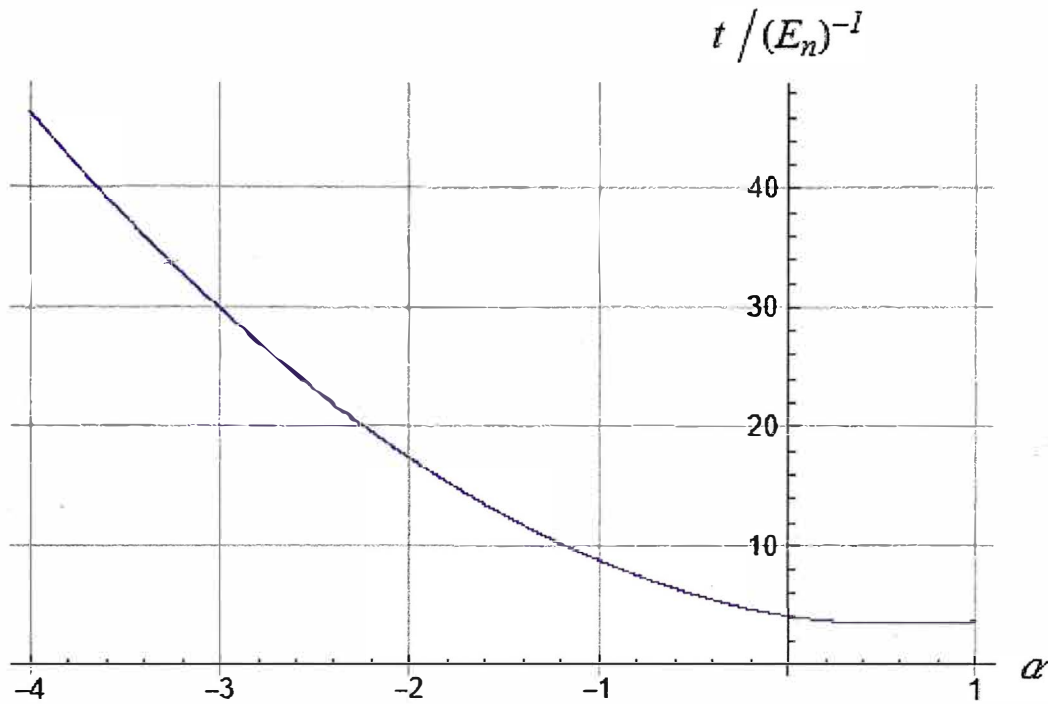


Figura 4.7: Tiempo de vida del polarón repulsivo dado por (2.41).

Finalmente, el polarón al vestirse de excitaciones elementales cambia sus propiedades de movilidad, las cuales definen una masa efectiva, la cual para el sistema en cuestión esta dada por

$$\frac{m}{m^*} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} Z(\alpha) \left[1 - \frac{1}{\pi(x + i\varepsilon) \ln^2 \left| \frac{-2e^{2\alpha}}{x + i\varepsilon} \right|} \right], \quad (4.3)$$

en donde, inicialmente se trató a la función de autoenergía con momentum no nulo como

$$\Sigma(k, \omega) = \frac{2\pi n_0}{m_r} \frac{1}{\ln \left| \frac{-E_b}{\omega - k^2/2M} \right|},$$

donde $M = m_I + m_B = 2m$, ya que se considera que ambas partículas tienen la misma masa.

En las Fig. 4.8 y 4.9 se muestran la masa efectiva de las cuasipartículas y el código usado para realizar las gráficas, donde podemos ver que la masa efectiva es siempre mayor a 1, es decir, la movilidad del polarón siempre se reduce y este se mueve como si fuera un objeto más masivo, y requiere desplazar bosones de su alrededor. Por otro lado, vemos que el polarón atractivo es el que más se *viste*, pero su masa efectiva permanece debajo de 2. Esto es consecuencia de que para interacciones fuertes, la impureza tiende a formar un estado ligado, el cual está formado por la impureza y un bosón del medio, por tanto, la masa efectiva tenderá a dos. Sin embargo, como el polarón pierde todo su peso para cuando esta saturación sucede, nunca se observa que la masa efectiva es dos.

```

m1 = (Re[1 - g1]) / Re[1 - g1 / 2];
    {parte real} {parte real}

M1 = {-a1, m1};

Mef1 = Transpose[M1];
    {transposición}

ListPlot[Mef1,
    {representación de lista}
  AxesLabel -> {Style["x", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"],
    {etiqueta de ejes} {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra}
    Style["mef", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"]}, Gridlines -> Automatic,
    {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra} {familia de línea} {automático}
  PlotLegends -> {"Polarón atractivo"}, PlotStyle -> Thick}
    {leyendas de representación} {estilo de representación} {grueso}

m2 = (Re[1 - g2]) / Re[1 - g2 / 2];
    {parte real} {parte real}

M2 = {-a2, m2};

Mef2 = Transpose[M2];
    {transposición}

ListPlot[Mef2,
    {representación de lista}
  AxesLabel -> {Style["x", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"],
    {etiqueta de ejes} {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra}
    Style["mef/m", Italic, Black, 15, FontFamily -> "Times New Roman"]}, Gridlines -> Automatic,
    {estilo} {itálica} {negro} {familia de tipo de letra} {familia de línea} {automático}
  PlotLegends -> {"Polarón repulsivo"}, PlotStyle -> Thick}
    {leyendas de representación} {estilo de representación} {grueso}

```

Figura 4.8: Código en Wolfram de la masa efectiva de los polarones atractivos y repulsivos

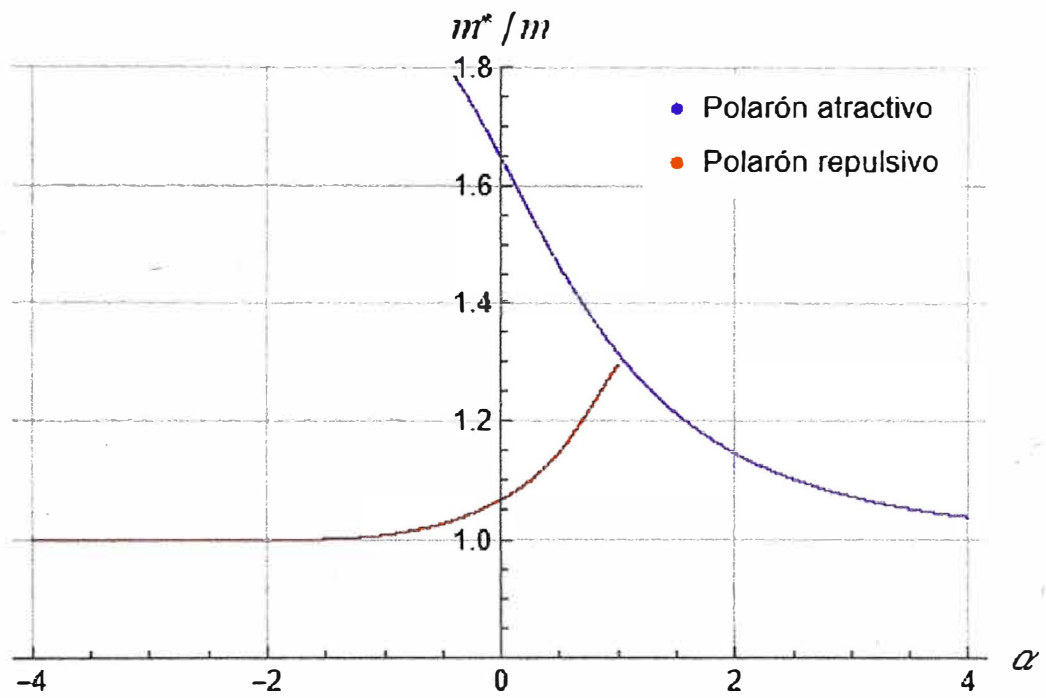


Figura 4.9: Masa efectiva de los polarones atractivos y repulsivos

Esto finaliza el estudio de las propiedades espectrales y de cuasipartícula de una impureza confinada en un condensado de Bose-Einstein en presencia de una resonancia de Feshbach.

Capítulo 5

CONCLUSIONES

Se demostró que la función de Green es una herramienta poderosa para entender las propiedades espectrales y de cuasipartícula de una impureza cuántica fuertemente acoplada a un gas de Bose-Einstein. Mientras que la función espectral nos da acceso a la distribución de excitaciones coherentes e incoherentes del sistema, la descripción en términos de cuasipartícula nos permite hacer una descripción cuantitativa y cualitativa del sistema.

Para el sistema bajo estudio, una impureza cuántica en un BEC bidimensional, se pudo apreciar que, a partir del formalismo de la función de Green, es posible encontrar las energías de los estados ligados de los polarones de Bose.

Además, se logró justificar la forma asignada para la autocenergía, que dará lugar a la función de Green del sistema interactuante, viendo que los polos de la función de Green otorgan las energías de los estados ligados del sistema, y que la información espectral de la función de Green está completamente contenida en su parte imaginaria. La función espectral permite entender cómo varía la intensidad de la interacción a medida que cambia el parámetro α , obteniendo interacciones débiles para $\alpha \gg 0$ (interacción atractiva débil, baja energía de enlace y molécula muy poco definida) y $\alpha \ll 0$ (interacción repulsiva débil, alta energía de enlace y molécula bien definida) y relativamente fuertes para $\alpha \rightarrow 0^+$ (gran aumento de la atracción, aumento de la energía de ligadura, la molécula adquiere

definición y disminuye la longitud de dispersión) y $\alpha \rightarrow 0^-$ (aumento ligero de la repulsión, disminución de la energía de ligadura, pérdida de definición y aumento de la longitud de dispersión). Por otro lado, se muestra la importancia de la función de Green como elemento descriptivo para la tasa de probabilidad de transición y cómo el tiempo de vida media del polarón afecta a su comportamiento, razón por la que fue necesaria describirla de forma gráfica, dejando claro que el polarón solo decaerá si no pertenece a un estado ligado. El desarrollo experimental es posible realizarlo trabajando con resonancias de Feshbach [Ap. C], principalmente variando al parámetro α en función a un campo magnético externo.

El estudio de impurezas cuánticas en fluidos cuánticos de materia es un tema relevante y de actualidad tanto para sistemas de gases ultrafríos, así como para sistemas de la materia condensada, tales como catástrofe de ortogonalidad [24, 25, 26], física de Efimov [27, 28, 29], estados de pocos cuerpos [30, 31], interacciones polarón-polarón [32, 33, 34, 35], interacciones de largo rango [36, 37], correcciones de rango finito [38], entre otros fenómenos interesantes, que han sido ampliamente estudiados en 3 dimensiones pero aún no se exploran en su totalidad, tanto en el contexto atómico como en el de la materia condensada.

Este estudio por provee de un formalismo general el cual puede ser aplicado en distintos sistemas, o para entender otras fases de la materia las cuales pueden surgir del acomplamiento de muchas impurezas, tales como formación de bipolarones, estados de pocos cuerpos e incluso superconductividad mediada.

Los resultados del capítulo 4 se encuentran publicados en la revista *Atoms*. Para el desarrollo numérico se usó Python 3.9 y las gráficas se realizaron en Wolfram Mathematica 13.

Apéndice A

Formalismos

A.1. Segunda cuantización

Sea el operador hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r), \quad (\text{A.1})$$

donde las energías del sistema están dadas por

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle, \quad (\text{A.2})$$

además $\langle r|E\rangle = \psi_E(r)$.

A.2. Estados Coherentes

Se conocen como estados coherentes a los autoestados de los operadores de creación y aniquilación. Ejemplos físicos importantes de sistemas que están en un estado coherente son los láseres y los condensados de Bose-Einstein. El efecto usual que tiene un operador aniquilación sobre un estado de N partículas está dado por

$$\hat{a}|N\rangle = \sqrt{N}|N-1\rangle, \quad (\text{A.3})$$

y un operador de creación

$$\hat{a}^\dagger|N\rangle = \sqrt{N+1}|N+1\rangle, \quad (\text{A.4})$$

Pero si se aplican estos operadores sobre una superposición de estados

$$\hat{a} \sum_{N=0}^M \psi_N |N\rangle = \sum_{N=0}^{M-1} \psi_{N+1} \sqrt{N+1} |N+1\rangle, \quad (\text{A.5})$$

para un número finito de términos, el estado con autovalor de \hat{N} más alto desaparece de la superposición, lo cual significa que este estado no puede ser un autoestado del operador aniquilación.

Por otro lado, si la superposición tiene un número infinito de términos, el problema podría resolverse. Sea el estado

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\phi^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle = e^{\phi \hat{a}^\dagger} |0\rangle \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\phi^N \hat{a}^{\dagger N}}{N!} |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

este estado cumple $\hat{a}|\phi\rangle = \phi|\phi\rangle$, donde el estado $|\phi\rangle$ es un estado coherente para un sistema con un solo modo de vibración. El estado normalizado tiene la forma

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= e^{-|\phi|^2/2} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\phi^N}{\sqrt{N!}} |N\rangle = e^{-|\phi|^2/2} e^{\phi \hat{a}^\dagger} |0\rangle \\ &= e^{-|\phi|^2/2} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\phi^N \hat{a}^{\dagger N}}{N!} |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Y en caso se busque el producto de dos estados coherentes

$$\begin{aligned} \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle &= \sum_N \sum_M \frac{\phi_2^{*N} \phi_1^M}{\sqrt{(N!)(M!)}} \langle N | M \rangle = \sum_N \frac{(\phi_2^* \phi_1)^N}{N!}, \\ &= e^{(\phi_2^* \phi_1)} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Si ahora se quiere tratar un sistema con muchos cuerpos, de forma que un estado $|N\rangle = |\dots, N_{\mathbf{n}, \alpha}, \dots\rangle$ expresa la cantidad de partículas del sistema y su distribución,

siendo $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ valores enteros que denotan los tres números cuánticos necesarios para especificar autoestados de una partícula de spin α en un potencial externo, será posible modificar la cantidad de partículas mediante los nuevos operadores de creación y aniquilación

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}|N\rangle &= \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}|\dots, N_{\mathbf{n},\alpha}, \dots\rangle = (\pm 1)^{M_{\mathbf{n},\alpha}} \sqrt{N_{\mathbf{n},\alpha}} |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha} - 1, \dots\rangle \\ \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger|N\rangle &= \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger|\dots, N_{\mathbf{n},\alpha}, \dots\rangle = (\pm 1)^{M_{\mathbf{n},\alpha}} \sqrt{1 \pm N_{\mathbf{n},\alpha}} |\dots, N_{\mathbf{n},\alpha} + 1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (\text{A.9})$$

donde el factor $M_{\mathbf{n},\alpha}$ da el número total de estados ocupados de una sola partícula que son ordenados a la izquierda del estado de una partícula correspondiente a $N_{\mathbf{n},\alpha}$, y el signo superior (inferior) corresponde a bosones (fermiones).

Con esto en mente es posible expresar el estado $|N\rangle$ en función de operadores de creación

$$|N\rangle = \prod_{\mathbf{n},\alpha} \frac{(\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha})^{N_{\mathbf{n},\alpha}}}{\sqrt{N_{\mathbf{n},\alpha}!}} |0\rangle, \quad (\text{A.10})$$

donde para los bosones el orden de los operadores de creación no importa, mientras que para los operadores de creación fermiónicos son ordenados de la misma forma que los números de ocupación.

Un estado coherente con varios modos de vibración (multimodal) tiene la forma (generalizando B.4)

$$|\phi\rangle = \exp\left\{\sum_{\mathbf{n},\alpha} \phi_{\mathbf{n},\alpha} \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger\right\} |0\rangle = \prod_{\mathbf{n},\alpha} \left[\sum_{N_{\mathbf{n},\alpha}=0}^{\infty} \frac{(\phi_{\mathbf{n},\alpha})^{N_{\mathbf{n},\alpha}}}{\sqrt{N_{\mathbf{n},\alpha}!}} |N_{\mathbf{n},\alpha}\rangle \right] = \prod_{\mathbf{n},\alpha} |\phi_{\mathbf{n},\alpha}\rangle, \quad (\text{A.11})$$

aplicando un operador de aniquilación, se tiene

$$\hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}|\phi\rangle = \phi_{\mathbf{n},\alpha} \exp\left\{\sum_{\mathbf{n},\alpha} \phi_{\mathbf{n},\alpha} \hat{\psi}_{\mathbf{n},\alpha}^\dagger\right\} |0\rangle, \quad (\text{A.12})$$

entonces cumple con la definición de estado coherente.

Si se busca el producto de dos estados coherentes multimodales, se sigue de B.6 y B.9

$$\langle\phi|\phi'\rangle = \prod_{\mathbf{n},\alpha} e^{\phi_{\mathbf{n},\alpha}^* \phi'_{\mathbf{n},\alpha}} = \exp\left\{\sum_{\mathbf{n},\alpha} \phi_{\mathbf{n},\alpha}^* \phi'_{\mathbf{n},\alpha}\right\}, \quad (\text{A.13})$$

donde se deja en claro que estos estados coherentes no han sido normalizados. Para simplificar la notación se expresará el producto de B.11 como

$$\langle \phi | \phi' \rangle = e^{(\phi | \phi')}, \quad (\phi | \phi') = \sum_{\mathbf{n}, \alpha} \phi_{\mathbf{n}, \alpha}^* \phi'_{\mathbf{n}, \alpha} \quad (\text{A.14})$$

Se define el operador unidad \hat{I} dado por

$$\hat{I} = \int \prod_{\mathbf{n}, \alpha} \left[\frac{d^2 \phi_{\mathbf{n}, \alpha}}{\pi} \right] e^{-(\phi^* | \phi)} |\phi\rangle \langle \phi| \quad (\text{A.15})$$

esto se puede probar partiendo del caso con un solo modo de vibración y usando (B.4)

$$\int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} \sum_{N, N'} e^{-\phi^* \phi} \frac{\phi^N |N\rangle}{\sqrt{N!}} \frac{\phi^{*N'} \langle N'|}{\sqrt{N'!}} \quad (\text{A.16})$$

haciendo un cambio de variable, siendo $\phi = r e^{i\theta}$, se considerará $d\phi d\phi^* = d^2\phi = r dr d\theta$, reemplazando

$$\hat{I} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dr r e^{-r^2} \sum_{N, N'} \left[\frac{r^{N+N'}}{\sqrt{N!N'!}} \int_0^{2\pi} e^{i\theta N} e^{-i\theta N'} d\theta \right] |N\rangle \langle N'| \quad (\text{A.17})$$

y haciendo

$$\int_0^{2\pi} e^{i\theta(N-N')} d\theta = 2\pi \delta_{N, N'}$$

tras tener que

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{e^x - 1}{x} = 1$$

con un cambio de variable $t = r^2$ y sabiendo que $\Gamma(N) = (N-1)!$

$$\int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{N!} t^N \sum_N |N\rangle \langle N| = \frac{\Gamma(N+1)}{N!} \sum_N |N\rangle \langle N| = \hat{I} \quad (\text{A.18})$$

con esto, (B.13) queda demostrado.

Esto es útil para definir la traza de ciertos operadores $\text{Tr}[\hat{O}] = \sum_\nu \langle \nu | \hat{O} | \nu \rangle$, lo cual puede desarrollarse como

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{O}] &= \sum_\nu \langle \nu | \hat{O} | \nu \rangle = \sum_\nu \langle \nu | \hat{O} \hat{I} | \nu \rangle \\ &= \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\phi^* \phi} \sum_\nu \langle \phi | \nu \rangle \langle \nu | \hat{O} | \phi \rangle \\ &= \int \frac{d\phi^* d\phi}{\pi} e^{-\phi^* \phi} \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

y si tenemos un campo multimodal

$$\text{Tr}[\hat{O}] = \int \prod_{\mathbf{n}, \alpha} \left[\frac{d^2 \phi_{\mathbf{n}, \alpha}}{\pi} \right] e^{-(\phi|\phi)} \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle = \int d[\phi^*] d[\phi] e^{-(\phi|\phi)} \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle \quad (\text{A.20})$$

A.3. Ecuación de Movimiento

Es posible relacionar a la función de Green con la evolución en el tiempo de un sistema físico en base a su Hamiltoniano [48]. Sea

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}_0],$$

así, donde $\Theta(t)$ es la función paso de Heaviside

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{A,B}^r(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \{ \Theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_{\eta} \rangle \} \\ &= \delta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_{\eta} \rangle - \underbrace{i \Theta(t) \langle [[\hat{A}(t), \hat{H}_0], \hat{B}(0)]_{\eta} \rangle}_{G_{[\hat{A}(t), \hat{H}_0], \hat{B}}^r(t)}, \\ i \frac{\partial}{\partial t} G_{A,B}^r(t) &= \delta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_{\eta} \rangle + G_{[\hat{A}(t), \hat{H}_0], \hat{B}}^r(t), \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Apéndice B

Otros Formalismos

B.1. Integrales Gaussianas

Sea la función de distribución gaussiana de variable real

$$P(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha(x-x_0)^2}, \quad (\text{B.1})$$

siendo $P(x = x_0)$ el valor máximo de la función, donde su integral podría verse como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha(x-x_0)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad (\text{B.2})$$

y el valor de expectación de x es

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x P(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-\alpha(x-x_0)^2} = x_0, \quad (\text{B.3})$$

Si redefinimos $\alpha = -1/2G$, con $G < 0$, entonces

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left\{\frac{1}{2G}x^2\right\} = \sqrt{-2\pi G}, \quad (\text{B.4})$$

por otro lado, sea la **función generadora**

$$Z(J) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{\frac{1}{2G}(x-x_0)^2 + Jx\right\}, \quad (\text{B.5})$$

el factor lineal J es tal que permite la generación de momentos, resolviendo la integral

$$Z(J) = \exp\left\{-\frac{1}{2G}J^2 + Jx_0\right\}\sqrt{-G}, \quad (\text{B.6})$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z(J)} \frac{dZ(J)}{dJ} \Big|_{J=0} &= \langle x \rangle = x_0 \\ \frac{1}{Z(J)} \frac{d^2Z(J)}{dJ^2} \Big|_{J=0} &= \langle x^2 \rangle = -G + \langle x \rangle^2, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Ahora, si se tienen varias variables, se tiene la integral gaussiana con la forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\prod_{j=1}^n dx_j \right) \exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{x}\right\} \equiv \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\text{Det}(-\mathbf{G}^{-1})}}, \quad (\text{B.8})$$

donde $\mathbf{G} = [G_{i,j}]_{n \times n}$. Se tiene para la función generador

$$\begin{aligned} Z(\mathbf{J}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\mathbf{x}}{\sqrt{(2\pi)^n}} \exp\left\{\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{x}\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\mathbf{J} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{J} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{x}_0 - \frac{1}{2}\text{Tr}[\ln(-\mathbf{G}^{-1})]\right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

y con esto se buscan generar momentos

$$\langle x_{j_1}, \dots, x_{j_n}, \dots \rangle = \frac{1}{Z(\mathbf{J})} \frac{\partial^n}{\partial J_{j_1} \dots \partial J_{j_n}} Z(\mathbf{J}) \Big|_{\mathbf{J}=\mathbf{0}}, \quad (\text{B.10})$$

Para una de sus variables

$$\langle x_i \rangle = \frac{1}{Z(\mathbf{J})} \frac{\partial}{\partial J_i} Z(\mathbf{J}) \Big|_{\mathbf{J}=\mathbf{0}} = x_{0,i}, \quad (\text{B.11})$$

y para dos variables

$$\langle x_i x_j \rangle = \frac{1}{Z(\mathbf{J})} \frac{\partial^2}{\partial J_i \partial J_j} Z(\mathbf{J}) \Big|_{\mathbf{J}=\mathbf{0}} = -G_{ij}, \quad (\text{B.12})$$

es decir, $-G_{ij}$ actúa como función de correlación entre dos variables x_i y x_j , y depende del comportamiento del sistema en estudio.

Si el sistema es multivariable complejo, entonces la función generadora tendrá la forma

$$Z(\mathbf{J}, \mathbf{J}^*) = \int \prod_{\alpha} \frac{dz_{\alpha}^* dz_{\alpha}}{\pi} \exp \left[\mathbf{z}_{\alpha}^* \mathbf{G}_{\alpha,\alpha}^{-1} \mathbf{z}_{\alpha} + \mathbf{z}_{\alpha}^* \cdot \mathbf{J}_{\alpha} + \mathbf{J}_{\alpha}^* \cdot \mathbf{z}_{\alpha} \right] \quad (\text{B.13})$$

donde si se tuviera un solo par de variables (z, z^*) , la correlación de estas variables estaría dado por

$$\langle zz^* \rangle = \frac{1}{Z(J, J^*)} \frac{d^2}{dJ^* dJ} Z(J, J^*) \Big|_{J=J^*=0} = -G$$

y si ahora las variables son funciones complejas denotadas por $\phi_\alpha(x, t)$ y $\phi_{\alpha'}^*(x', t')$ se deduce que la forma de la función generadora será

$$Z[J, J^*] = \int d[\phi^*] d[\phi] \exp \left\{ \sum_{\alpha} \int dt \int dx \left[\sum_{\alpha'} \int dt' \int dx' \phi_{\alpha'}^* G_{\alpha, \alpha'}^{-1} \phi_{\alpha'} + \phi_{\alpha}^* J_{\alpha} + J_{\alpha}^* \phi_{\alpha} \right] \right\} \quad (\text{B.14})$$

y si se busca la correlación entre las dos funciones $\phi_\alpha(x, t)$ y $\phi_{\alpha'}^*(x', t')$, el camino será análogo a los mostrados anteriormente

$$\langle \phi_\alpha(x, t) \phi_{\alpha'}^*(x', t') \rangle = \frac{1}{Z[J, J^*]} \frac{\delta^2 Z[J, J^*]}{\delta J_{\alpha}^* \partial J_{\alpha'}} \Big|_{J=J^*=0} = -G_{\alpha, \alpha'} \quad (\text{B.15})$$

B.2. Acción de un sistema físico

Se entiende por mecánica clásica que la acción de un sistema físico queda definido mediante la integral en el tiempo del lagrangiano

$$S[\mathbf{dx}/dt, \mathbf{x}] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(\mathbf{x}, \mathbf{dx}/dt, t), \quad (\text{B.16})$$

donde el lagrangiano se define por

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{dx}/dt, t) = \frac{1}{2} m \left(\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} \right)^2 - V(\mathbf{x}(t)),$$

y como la relación entre el Hamiltoniano y el lagrangiano es

$$\begin{aligned} H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) &= \sum_i \frac{dx_i}{dt} p_i - L(\mathbf{x}, \mathbf{dx}/dt, t) \\ L(\mathbf{x}, \mathbf{dx}/dt, t) &= \sum_i \frac{dx_i}{dt} p_i - H(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t), \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

entonces, la acción puede dejarse expresada en función del Hamiltoniano

$$S[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \mathbf{p}(t) \cdot \frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} - H(\mathbf{p}(t), \mathbf{x}(t), t) \right\}. \quad (\text{B.18})$$

B.3. Desarrollo de la amplitud de transición como una funcional integral

Se desea calcular la amplitud de transición mecánico-cuántica para una partícula que inicialmente está en \mathbf{x}_a en el tiempo t_a , para ser encontrado en un tiempo posterior t_b en la posición \mathbf{x}_b , dado por [14]

$$U(\mathbf{x}_b, t_b, \mathbf{x}_a, t_a) = \langle \phi(\mathbf{x}_b) | \hat{U}(t_b, t_a) | \phi(\mathbf{x}_a) \rangle \quad (\text{B.19})$$

donde $\hat{U}(t_b, t_a)$ es el operador de evolución de un sistema dado entre los tiempos t_a y t_b . Para dar forma a esta expresión se divide el dominio temporal en N intervalos, y cada intervalo está etiquetado mediante la letra k , así

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \exp \left[-i(t_b - t_a) \hat{H} / \hbar \right] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \Delta t_k \hat{H} / \hbar \right] \quad (\text{B.20})$$

Para un sistema expresado con estados coherentes, el operador identidad \hat{I}_k puede expresarse como [45]

$$\hat{I}_k = \int \prod_{\alpha} \frac{d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}}{\pi} \exp \left(- \sum_{\alpha} \int dx |\phi_{\alpha,k}|^2 \right) |\phi_{\alpha,k}\rangle \langle \phi_{\alpha,k}| \quad (\text{B.21})$$

donde, por simplicidad, omitiremos la dependencia espacial de las funciones de campo, incluyendo la integral sobre x del término exponencial. Tomando el primer estado como $|\phi_0\rangle$ y al último como $|\phi_N\rangle$, entonces la amplitud de transición es dada por

$$\begin{aligned} \langle \phi_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \phi_a \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \phi_N | \prod_{k=1}^{N-1} \hat{I}_k \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \Delta t_k \hat{H} / \hbar \right] | \phi_0 \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^{N-1} \prod_{\alpha} \int \frac{d\phi_{\alpha,k}^* d\phi_{\alpha,k}}{\pi} \exp \left[- \sum_{\alpha,k} |\phi_{\alpha,k}|^2 \right] \langle \phi_N | \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \Delta t_k \hat{H} / \hbar \right] | \phi_k \rangle \langle \phi_{\alpha,k} | \phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

acomodando la última productoria

$$\langle \phi_N | \prod_{k=1}^N \exp \left[-i \Delta t_k \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha,k} \rangle \langle \phi_{\alpha,k} | \phi_0 \rangle = \langle \phi_N | \left(\prod_{k=1}^{N-1} \exp \left[-i \Delta t_k \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha,k} \rangle \langle \phi_{\alpha,k} | \right) \exp \left[-i \Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_0 \rangle$$

esto puede expresarse como

$$\begin{aligned} & \langle \phi_N | \left(\exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{N-1} \rangle \langle \phi_{\alpha, N-1} | \right) \left(\exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha, N-2} \rangle \langle \phi_{\alpha, N-2} | \right) \dots \\ & \times \left(\exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha, 2} \rangle \langle \phi_{\alpha, 2} | \right) \left(\exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha, 1} \rangle \langle \phi_{\alpha, 1} | \right) \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_0 \rangle \end{aligned}$$

se ve que otra forma de expresar esta productoria es acumulando los términos en grupos de tres, obteniendo

$$\langle \phi_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \phi_a \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^{N-1} \prod_{\alpha} \int \frac{d\phi_{\alpha, k}^* d\phi_{\alpha, k}}{\pi} \exp \left[- \sum_{\alpha, k} |\phi_{\alpha, k}|^2 \right] \prod_{k=1}^N \langle \phi_{\alpha, k} | \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha, k-1} \rangle \quad (\text{B.23})$$

en este desarrollo, se ve que es posible aproximar

$$\begin{aligned} \langle \phi_j | \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{j-1} \rangle & \approx \langle \phi_j | 1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} \hat{H} | \phi_{j-1} \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ & = \langle \phi_j | \phi_{j-1} \rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle \phi_j | \hat{H} | \phi_{j-1} \rangle + \mathcal{O}(\Delta t) \\ & = \langle \phi_j | \phi_{j-1} \rangle \cdot \exp \left(- \frac{i\Delta t}{\hbar} \frac{\langle \phi_j | \hat{H} | \phi_{j-1} \rangle}{\langle \phi_j | \phi_{j-1} \rangle} \right) + \mathcal{O}(\Delta t) \\ & = \langle \phi_j | \phi_{j-1} \rangle \cdot \exp \left(- \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_j^*, \phi_{j-1}) \right) + \mathcal{O}(\Delta t) \\ & = \exp \left(\phi_j^* \phi_{j-1} - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_j^*, \phi_{j-1}) \right) + \mathcal{O}(\Delta t) \end{aligned}$$

donde se entiende si se tienen dos estados coherentes $|\phi_a\rangle$ y $|\phi_b\rangle$, entonces su producto es dado por

$$\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \exp(\phi_a^* \phi_b)$$

la productoria de funciones exponenciales genera una sumatoria de los exponentes, retornando al índice k se tendrá ahora

$$\prod_{k=1}^N \langle \phi_{\alpha, k} | \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha, k-1} \rangle = \exp \left(\sum_{k=1}^N \left[\phi_{\alpha, k}^* \phi_{\alpha, k-1} - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_{\alpha, k}^*, \phi_{\alpha, k-1}) \right] \right) \quad (\text{B.24})$$

ahora, incluyendo el exponencial con una sumatoria de módulos de ϕ_k después de dejar ir

el último término de la sumatoria, se tendrá,

$$\begin{aligned} & \exp \left[- \sum_k^{N-1} |\phi_{\alpha,k}|^2 \right] \prod_{k=1}^N \langle \phi_k | \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha,k-1} \rangle \\ &= \exp \left(\sum_{k=1}^{N-1} \left[\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k} - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right) \cdot \exp \left(\phi_{\alpha,N}^* \phi_{\alpha,N-1} - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_{\alpha,N}^*, \phi_{\alpha,N-1}) \right) \end{aligned}$$

en el primer exponencial puede hacerse la factorización

$$\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k} = \phi_{\alpha,k}^* \frac{(\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1})}{\Delta t} \left(\frac{-i\Delta t}{\hbar} \right) (-i\hbar)$$

de esto, en la primera exponencial se factoriza $-i\Delta t/\hbar$, entonces

$$\begin{aligned} & \exp \left(\sum_{k=1}^{N-1} \left[\phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k} - \frac{i\Delta t}{\hbar} H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right) \\ &= \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N-1} (\Delta t) \left[\phi_{\alpha,k}^* \frac{(\phi_{\alpha,k} - \phi_{\alpha,k-1})}{\Delta t} (-i\hbar) + H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right] \right) \end{aligned}$$

ahora, aplicando el límite $\Delta t \rightarrow 0$, se tendrá

$$\begin{aligned} & \exp \left[- \sum_{k,a}^{N-1} |\phi_{\alpha,k}|^2 \right] \prod_{k=1}^N \langle \phi_{\alpha,k} | \exp \left[-i\Delta t \hat{H} / \hbar \right] | \phi_{\alpha,k-1} \rangle = \\ & \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int dt \left[i\hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) - H(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)) \right] \right) \cdot \exp(\phi_{\alpha}^*(t_b) \phi_{\alpha}(t_b)) \end{aligned}$$

entonces, aplicando en la expresión original (A.22)

$$\langle \phi_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \phi_a \rangle = \int \prod_{\alpha} \frac{d\phi_{\alpha}^* d\phi_{\alpha}}{\pi} \exp(\phi_{\alpha}^*(t_b) \phi_{\alpha}(t_b)) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S[\phi_{\alpha}, \phi_{\alpha}^*] \right) \quad (\text{B.25})$$

siendo $S[\phi, \phi^*]$ la funcional de la acción del sistema, dada por

$$S[\phi_{\alpha}, \phi_{\alpha}^*] = \int dt \left[i\hbar \phi_{\alpha}^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\alpha}(t) - H(\phi_{\alpha}^*(t), \phi_{\alpha}(t)) \right] \quad (\text{B.26})$$

donde se tiene el lagrangiano [40]

$$\hat{L} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \quad (\text{B.27})$$

y en caso, se busque la acción euclidiana (considere la rotación de Wick en el plano complejo), sea posible haciendo el cambio $t = -i\tau$, con lo que el lagrangiano tendría la forma

$$\hat{L}_E = -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \hat{H} \quad (\text{B.28})$$

y aplicando la rotación de Wick en la acción

$$S_E[\phi_\alpha, \phi_\alpha^*] = i \int d\tau \left[\hbar \int dx \phi_\alpha^*(x, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\alpha(x, \tau) + H(\phi_\alpha^*(x, \tau), \phi_\alpha(x, \tau)) \right] \quad (\text{B.29})$$

donde se ve que se devolvió la dependencia espacial omitida al inicio del desarrollo. Aplicando esta nueva acción en la expresión de transición

$$\langle \phi_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \phi_a \rangle = \int \prod_\alpha \frac{d\phi_\alpha^* d\phi_\alpha}{\pi} \exp[\phi_\alpha^*(x_b, -i\tau_b) \phi_\alpha(x_b, -i\tau_b)] \exp(-S_E[\phi_\alpha, \phi_\alpha^*]/\hbar) \quad (\text{B.30})$$

Apéndice C

Resonancia de Feshbach en dos dimensiones

En esa sección, se mostrará un desarrollo ya conocido de la teoría de la resonancia de Feshbach [16], el cual se aplicará en el caso de un sistema bidimensional.

C.1. Fundamentos preliminares

Iniciamos viendo que la colisión entre dos partículas con grados de libertad internos son dados por un Hamiltoniano interno H^{int} ,

$$H^{int}|\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad (\text{C.1})$$

donde $|\alpha\rangle$ y ϵ_α son los autoestados y su correspondiente autoenergía de átomos individuales. Una colisión entre dos cuerpos es descrito por el hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m_r} + \sum_{i=1}^2 H_i^{int} + V(r) \quad (\text{C.2})$$

dado en el sistema del centro de masa, con p como el momentum relativo y m_r es la masa reducida.

Esta última ecuación es la suma de una parte con autoestados $|\alpha\beta\rangle$ (“canales”) que tienen asintóticamente a un producto simetrizado de estados internos de átomos separados $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, y de una interacción de rango finito $V(r)$ la cual se acopla a los canales. La energía asociada a un autoestado $|\alpha\beta\rangle$ es $E_{\alpha,\beta} = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta + \hbar^2 k_{\alpha,\beta}^2 / 2m_r$, donde $\hbar k_{\alpha,\beta}$ es el momentum relativo de las dos partículas entrantes. La magnitud asintótica del momentum para el canal $|\alpha'\beta'\rangle$ es $k_{\alpha'\beta'} = \sqrt{2m_r(E_{\alpha,\beta} - \varepsilon_{\alpha'} - \varepsilon_{\beta'})}$. Se dice que el canal está abierto (cerrado) si el momentum un valor positivo y real (imaginario).

El espacio de Hilbert que describe los grados de libertad espaciales y de spin se dividirán en un subespacio P para canales abiertos y otro Q para canales cerrados. El vector de estado $|\Psi\rangle$ y la ecuación de Schrodinger $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ son proyectadas sobre los dos subespacios por medio de los operadores de proyección \hat{P} y \hat{Q} que satisfacen $\hat{P} + \hat{Q} = \hat{I}$ y $\hat{P}\hat{Q} = 0$, es decir

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\Psi_P\rangle \\ |\Psi_Q\rangle \end{pmatrix}$$

siendo el hamiltoniano expresado por

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{PP} & \hat{H}_{PQ} \\ \hat{H}_{QP} & \hat{H}_{QQ} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}_P & \hat{V}_t \\ \hat{V}_t & \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}_Q + \Delta \end{pmatrix} \quad (\text{C.3})$$

donde \hat{V}_t es el potencial de transición entre canales, \hat{V}_P y \hat{V}_Q son el potencial en cada canal (se desprecian cuando $r \rightarrow \infty$), Δ es la diferencia positiva entre umbrales de energía $E_{th}(Q) - E_{th}(P)$ y los operadores \hat{P} y \hat{Q} dados por

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

La solución formal de las ecuaciones acopladas obedecen la relación

$$|\Psi_Q\rangle = (E - \hat{H}_{QQ} + i\delta)^{-1} \hat{H}_{QP} |\Psi_P\rangle \quad (\text{C.4})$$

donde $\hat{H}_{XY} = \hat{X}\hat{H}\hat{Y}$, δ es un término infinitesimal, y

$$(E - \hat{H}_{PP} - \hat{H}'_{PP})|\Psi_P\rangle = 0 \quad (\text{C.5})$$

siendo

$$\hat{H}'_{PP} = \hat{H}_{PQ}(E - \hat{H}_{QQ} + i\delta)^{-1}\hat{H}_{QP} \quad (\text{C.6})$$

Se define el término $\hat{H}^{\text{eff}} = \hat{H}_{PP} + \hat{H}'_{PP}$ como el hamiltoniano efectivo del canal abierto el cual describe las resonancias de Feshbach, da una interacción átomo-átomo efectiva en el subespacio P incorporando el efecto de Q , los efectos son debido a la existencia de estados ligados. Esto representa una interacción efectiva retardada no local en el subespacio P debido a transiciones al subespacio Q y viceversa.

Una resonancia de Feshbach [23] aparece cuando los verdaderos estados ligados que pertenecen al subespacio Q coincide con la energía de los canales abiertos, por lo que es posible tener transiciones durante el proceso de colisión.

Haciendo $\hat{H}_{PP} = \hat{H}_0 + \hat{V}_P$. donde \hat{H}_0 incluye la energía cinética del movimiento relativo y el hamiltoniano interno, entonces los elementos de la matriz T en el subespacio P entre estados de onda plana con momento relativo k y k' sería

$$\langle k'|T|k\rangle \approx \langle k'|T_1|k\rangle + \langle k'|(1 - \hat{V}_P G_0)^{-1}\hat{H}'_{PP}(1 - G_0\hat{V}_P)^{-1}|k\rangle \quad (\text{C.7})$$

con \hat{H}'_{PP} obtenido de (C.6).

Aquí $T_1 = \hat{V}_P + \hat{V}_P G_0 \hat{V}_P$ representa al proceso de dispersión si el subespacio Q es ignorado, y $(1 - G_0\hat{V}_P)^{-1}$ es el operador debido al potencial de interacción \hat{V}_P , con $G_0 = (E - H_0)^{-1}$ [22].

En (C.7) el efecto de los canales cerrados fueron incluidos hasta el primer orden en H'_{PP} . En el límite de velocidad relativa nula, despreciando las diferencias entre las ondas entrantes y salientes y denotándolas simplemente como $|\psi_0\rangle$, la expresión (C.7) se convierte en

$$T(0) = T_1(0) + \sum_n \frac{|\langle \psi_n | H_{QP} | \psi_0 \rangle|^2}{E_{th} - E_n} \quad (\text{C.8})$$

donde la sumatoria se da sobre todos los estados $|\psi_n\rangle$ en el subespacio Q . Aquí, $T_1(0)$ es la matriz T estimada en ausencia de canales cerrados y E_{th} es la energía umbral para el estado $|\psi_0\rangle$ al no haber energía cinética. Finalmente, cuando la energía umbral está cerca

a la energía E_{res} de un estado ligado específico $|\psi_{res}\rangle$, esta contribución será dominante y las contribuciones de todos los demás estados pueden incluirse en $T_1(0)$ a través de una longitud de dispersión efectiva no resonante a_{nr} .

C.2. Aplicación al caso de dos dimensiones

Para un polarón de Bose en dos dimensiones, se tiene [21]

$$T(0) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_r} \frac{1}{\ln|\hbar/m\omega a_{nr}^2|} + \frac{|\langle\psi_{res}|\hat{V}_t|\psi_0\rangle|^2}{E_{th} - E_{res}} \quad (\text{C.9})$$

donde \hat{V}_t fue definido en (C.1). La ecuación (C.9) es el resultado principal, ahora es necesario relacionar al denominador de la energía a algún parámetro externo. Si consideramos que el denominador de la energía se anula para cierto valor B_0 de un campo magnético, entonces

$$E_{th} - E_{res} \approx (m_{res} - m_\alpha - m_\beta)(B - B_0) \quad (\text{C.10})$$

donde $m_{\alpha,\beta} = -\partial\varepsilon_{\alpha,\beta}/\partial B$ son los momentos magnéticos de los dos átomos que colisionan en el canal abierto y $m_{res} = -\partial E_{res}/\partial B$ es el momento magnético del estado ligado molecular. Así, la ecuación (C.9) se convierte en

$$T(0) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_r} \left(\frac{1}{\ln|\hbar/m\omega a_{nr}^2|} + \frac{\Delta B}{B - B_0} \right) \quad (\text{C.11})$$

donde el parámetro de anchura ΔB es definido por

$$\Delta B = \frac{m_r}{2\pi\hbar^2} \frac{|\langle\psi_{res}|\hat{V}_t|\psi_0\rangle|^2}{m_{res} - m_\alpha - m_\beta} \quad (\text{C.12})$$

Los términos de orden superior en H'_{PP} pueden llevar a un ensanchamiento de la resonancia. Sin embargo, el ancho de resonancia de estados con energía cercana a la energía umbral en el canal abierto es usualmente pequeño debido a la baja densidad de estados, y las resonancias de Feshbach usualmente son muy delgadas.

Bibliografía

- [1] Onnes, H. K. (1991). “Further experiments with liquid helium”. *Boston Studies in the Philosophy of Science*, 201–220. doi:10.1007/978-94-009-2079-8_10
- [2] N. Bogoliubov. “On the theory of superfluidity”. *Journal of Physics*, 11:23-32, 1947
- [3] Ogg, R. A. (1946). “Bosc-Einstein Condensation of Trapped Electron Pairs. Phase Separation and Superconductivity of Metal-Ammonia Solutions”. *Physical Review*, 69(5-6), 243–244. doi:10.1103/physrev.69.243
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. “Theory of superconductivity”. *Phys. Rev.*, 108:1175-1204, Dec 1957.
- [5] L. N. Cooper. “Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas”. *Phys. Rev.*, 104: 1189-1190, 1956.
- [6] Mullin, W. J., Krotkov, R., Laloë, F. (2006). The origin of the phase in the interference of Bosc-Einstein condensates. *American Journal of Physics*, 74(10): 880–887. doi:10.1119/1.2210489
- [7] Chen, Q., Levin, K., Kosztin, I. (2001). “Superconducting phase coherence in the presence of a pseudogap: Relation to specific heat, tunneling, and vortex core spectroscopies”. *Physical Review B*, 63(18). doi:10.1103/physrevb.63.184519

- [8] Wang, C.-C. J., Duine, R. A., MacDonald, A. H. (2010). “Quantum vortex dynamics in two-dimensional neutral superfluids”. *Physical Review A*, 81(1). doi:10.1103/physreva.81.013609
- [9] Ginzburg, V. L., Landau, L. D. (n.d.). “On the Theory of Superconductivity. On Superconductivity and Superfluidity”, 113–137. doi:10.1007/978-3-540-68008-6_4
- [10] Chevy, F., Mora, C. (2010). “Ultra-cold polarized Fermi gases”. *Reports on Progress in Physics*, 73(11), 112401. doi:10.1088/0034-4885/73/11/112401
- [11] L. D. Landau, S. I. Pekar. “Effective mass of a polaron”. *Phys. Z. Sowjetunion*, 18: 419, 1948.
- [12] Chevy, F. (2006). “Universal phase diagram of a strongly interacting Fermi gas with unbalanced spin populations”. *Physical Review A*, 74(6). doi:10.1103/physreva.74.063628
- [13] Sá de Melo, C. A. R. (2008). “When fermions become bosons: Pairing in ultracold gases”. *Physics Today*, 61(10), 45–51. doi:10.1063/1.3001867
- [14] H. Stoof, K. Gubbels, D. Dickerscheid (2009), “Ultracold Quantum Fields”. Springer, Pág. 159-163. ISBN-13 978-1-4020-8762-2
- [15] Werner, F., & Castin, Y. (2012). General relations for quantum gases in two and three dimensions: Two-component fermions. *Physical Review A*, 86(1). doi:10.1103/physreva.86.013626
- [16] Prof. Michael Moore., Phys 852, Quantum mechanics II, “Introduction to Scattering Theory”, Spring 2008.
- [17] Randeria, M., Duan, J.-M., Shieh, L.-Y. (1990). Superconductivity in a two-dimensional Fermi gas: Evolution from Cooper pairing to Bose condensation. *Physical Review B*, 41(1), 327–343. doi:10.1103/physrvb.41.327

- [18] Jesper Levinsen., Meera M. Parish., “Strongly interacting two-dimensional Fermi gases”, World Scientific Review, 2014.
- [19] Wael Chibani, “Self-Consistent Green’s Function Embedding for Advanced Electronic Structure Calculations based on a Dynamical Mean-Field Concept”, Universidad Técnica de Berlin, 2016.
- [20] S ogaard Christensen, Rasmus., “Polarons, Interacting impurities in ultracold gases”, Aarhus University, 2017.
- [21] K. Rajagopal, P. Vignolo, M. Tosi., “Feshbach resonances in a strictly two-dimensional atomic Bose gas”, Scuola Normale Superiore, Italia, 2004.
- [22] Pethick and Smith, “Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases”, 2da edici n , Cambridge, 2002.
- [23] Feshbach, H. “Unified theory of nuclear reactions”. *Annals of Physics*, 5(4), 357–390, 1958. doi:10.1016/0003-4916(58)90007-1
- [24] Massignan, P.; Yegovtsev, N.; Gurarie, V. “Universal Aspects of a Strongly Interacting Impurity in a Dilute Bose Condensate”. *Phys.Rev.Lett.*2021, 126, 123403. doi: 10.1103/PhysRevLett.126.123403
- [25] Guenther, N.E.; Schmidt, R.; Bruun, G.M.; Gurarie, V.; Massignan, P. “Mobile impurity in a Bose-Einstein condensate and the orthogonality catastrophe”. *Phys. Rev. A* 2021, 103, 013317. doi:10.1103/PhysRevA.103.013317
- [26] Yegovtsev, N.; Massignan, P.; Gurarie, V. “Strongly interacting impurities in a dilute Bose condensate”. *Phys. Rev. A* 2022, 106, 033305. doi:10.1103/PhysRevA.106.033305.
- [27] Christianen, A.; Cirac, J.I.; Schmidt, R. “Bose polaron and the Efimov effect: A Gaussian-state approach”. *Phys. Rev. A* 2022, 105, 053302. doi:10.1103/PhysRevA.105.053302

- [28] Sun, M.; Zhai, H.; Cui, X. “Visualizing the Efimov Correlation in Bose Polarons”. *Phys. Rev. Lett.* 2017, 119, 013401. doi:10.1103/PhysRevLett.119.013401.
- [29] Sun, M.; Cui, X. “Enhancing the Efimov correlation in Bose polarons with large mass imbalance”. *Phys. Rev. A* 2017, 96, 022707. doi:10.1103/PhysRevA.96.022707
- [30] Shchadilova, Y.E.; Schmidt, R.; Grusdt, F.; Demler, E. “Quantum Dynamics of Ultracold Bose Polarons”. *Phys. Rev. Lett.* 2016, 117, 113002. doi:10.1103/PhysRevLett.117.113002.
- [31] Christianen, A.; Cirac, J.I.; Schmidt, R. “Chemistry of a Light Impurity in a Bose-Einstein Condensate”. *Phys. Rev. Lett.* 2022, 128, 183401. doi:10.1103/PhysRevLett.128.183401
- [32] Naidon, P. “Two Impurities in a Bose-Einstein Condensate: From Yukawa to Efimov Attracted Polarons”. *Journal of the Physical Society of Japan* 2018, 87, 043002, [arXiv:cond-mat.quant-gas/1607.04507]. doi:10.7566/JPSJ.87.043002
- [33] Camacho-Guardian, A.; Peña Ardila, L.A.; Pohl, T.; Bruun, G.M. “Bipolarons in a Bose-Einstein Condensate”. *Phys. Rev. Lett.* 2018, 121, 013401. doi:10.1103/PhysRevLett.121.013401
- [34] Camacho-Guardian, A.; Bruun, G.M. “Landau Effective Interaction between Quasiparticles in a Bose-Einstein Condensate”. *Phys. Rev. X* 2018, 8, 031042. doi:10.1103/PhysRevX.8.031042
- [35] Fujii, K.; Hongo, M.; Euss, T. “Universal van der Waals force between heavy polarons in superfluids”. *arXiv e-prints* 2022, p. arXiv:2206.01048, [arXiv:cond-mat.quant-gas/2206.01048].
- [36] Ardila, L.A.P.; Pohl, T. “Ground-state properties of dipolar Bose polarons”. *Journal of*

Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 2018, 52, 015004. doi:10.1088/1361-6455/aaf35e.

- [37] Christensen, E.R.; Camacho-Guardian, A.; Bruun, G.M. “Charged Polarons and Molecules in a Bose-Einstein Condensate”. *Phys. Rev. Lett.* 2021, 126, 243001. doi:10.1103/PhysRevLett.126.243001
- [38] Levinscn, J.; Ardila, L.A.P.n.; Yoshida, S.M.; Parish, M.M. “Quantum Behavior of a Heavy Impurity Strongly Coupled to a Bosc Gas”. *Phys. Rev. Lett.* 2021, 127, 033401. doi:10.1103/PhysRevLett.127.033401
- [39] J. M. Vogels et al. “Experimental observation of the Bogoliubov transformation for a Bosc-Einstein condensed gas”, *Phys. Rev. Lett.*, 88:60402, 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.060402.
- [40] Gerard D. Mahan, “Many-Particle Physics”, 3era edición , Plenum Publishers, 2000.
- [41] Fetter. A, Walecka, “Quantum theory of many-particle systems”, McGraw-Hill, 1971
- [42] R. Rosenfelder, “Path Integrals in Quantum physics”, Lectures ETH Zurich, Suiza, 2017.
- [43] Bogoliubov, N. Shirkov, D.(1983), *Quantum Fields*, Moscú: Benjamin/Cummings Publishing Company. Inc., ISBN 0-8053-0983-7
- [44] Luis de la Peña, “Introducción a la mecánica cuántica”, Universidad Nacional Autónoma de México, 3era edición, 1991.
- [45] Mandel,L; Wolf, E. (1995), *Optical Coherence and Quantum Optics*, Cambridge UK: Cambridge University Press, ISBN 0-521-41711-2
- [46] Wick, G. C. (1954). “Properties of Bethe-Salpeter Wave Functions”. *Physical Review* 96 (4): 1124–1134. Bibcode:1954PhRv...96.1124W. doi:10.1103/PhysRev.96.1124.

- [47] Newton, R.G.(1996), "Scattering theory of waves and particles", 2da edición, Springer, doi 10.1007/978-3-642-88128-2.
- [48] Rath, S. P., & Schmidt, R. (2013). "Field-theoretical study of the Bose polaron". *Physical Review A*, 88(5). doi:10.1103/physreva.88.053632
- [49] Jörg Schmalian, Lecture Notes, "Theory of Condensed Matter II", Karlsruhe Institute of Technology, 2018.
- [50] Berthod, C, Lecture Notes, "Applications of the many-body formalism in condensed-matter physics", Universidad de Genova, 2011.
- [51] Ryusuke Numata, "Bessel Function", Universidad de Maryland, 2008.
- [52] Galca, A., Gandolfi, S. et al., "Fermions in two dimensions: Scattering and many-body properties"., *Journal of Low Temperature Physics*, 2017.
- [53] Richard Lapidus., "Quantum-mechanical scattering in two dimensions", *American Journal of physics.*, 1980., doi: 10.1119/1.13004.
- [54] R. Von Baltz., "Green's Function Theory of the polaron Energy-Momentum Relation", Instituto Tecnológico de Karlsruhe, Alemania, 1972.
- [55] D. S. Petrov, G. V. Shlyapnikov., "Interatomic collisions in a tightly confined Bose gas", *Physical Review.*, 2001., doi: 10.1103/PhysRevA.64.012706.
- [56] Jörg Schmalian., "Second Quantization"., 2016.
- [57] Cárdenas-Castillo, L.F.; Camacho-Guardian, A. Strongly Interacting Bose Polarons in Two-Dimensional Atomic Gases and Quantum Fluids of Polaritons. *Atoms* 2023, 11, 3. <https://doi.org/10.3390/atoms11010003>.