



Numeričko proučavanje osobina brzo rotirajućih Boze-Ajnštajn kondenzata

Antun Balaž

Laboratorija za primenu računara u nauci, Institut za fiziku
Pregrevica 118, 11080 Beograd, <http://www.scl.rs/>

Saradnici: Ivana Vidanović, Axel Pelster, Aleksandar Bogojević



Sadržaj

- Uvod
 - Funkcionalni formalizam
 - Diskretizovana efektivna dejstva
 - Efektivna dejstva za višečestične sisteme
 - Dijagramatski prikaz efektivnih dejstava
- Idealni Boze gasovi
 - Jednočestična slika
 - Boze-Ajnštajn raspodela
 - Boze-Ajnštajn kondenzacija
- Numeričko proučavanje Boze-Ajnštajn kondenzata
 - Jednočestična svojstvena stanja
 - Globalne osobine Boze-Ajnštajn kondenzata
 - Prostorna gustina čestica u kondenzatu
 - Time-of-flight merenja raspodele čestica
- Zaključne napomene



Funkcionalni formalizam (1)

- Osnovne ideje o funkcionalnom formalizmu mogu se naći u radu: P. A. M. Dirac, *Physikalische Zeitschrift der Sowietunion* **3**, 64 (1933) - lagranžijanska formulacija kvantne mehanike
- Ričard Fajnman je razvio formalizam kakav danas znamo [R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)]
- Za razliku od klasične fizike, u kojoj (obično) postoji samo jedna trajektorija sistema za dati skup početnih uslova, u funkcionalnom formalizmu kvantne teorije moraju da se uzmu u obzir sve moguće evolucije
- Svaka od mogućih trajektorija doprinosi amplitudi prelaza kroz aditivni faktor $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$, gde je $S = \int L dt$ dejstvo koje odgovara datoj trajektoriji



Funkcionalni formalizam (2)

- Funkcionalni (path) integrali su originalno uvedeni u kvantnoj mehanici, gde se amplituda prelaza iz početnog stanja $|\alpha\rangle$ u finalno stanje $|\beta\rangle$ za vreme T može napisati u obliku

$$A(\alpha, \beta; T) = \langle \beta | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} | \alpha \rangle$$

- Isti pristup može da se primeni i u statističkoj fizici, gde particiona funkcija može da se napiše u sličnom obliku
- Za funkcionalne integrale u statističkoj fizici se obično kaže da se računaju u imaginarnom vremenu, pošto se mogu dobiti iz kvantno-mehaničkih izraza pomoću formalne smene

$$\frac{i}{\hbar} T \rightarrow -\beta_t = \frac{1}{k_B T_t}$$

gde je T_t termodinamička temperatura sistema



Funktionalni formalizam (3)

- Iz tehničkih razloga, veoma je uobičajeno raditi u imaginarnom vremenu, čak i kada se razmatraju kvantno-mehanički problemi ($\frac{i}{\hbar}T \rightarrow -\frac{1}{\hbar}T$)
- Standardno izvođenje započinje od identiteta

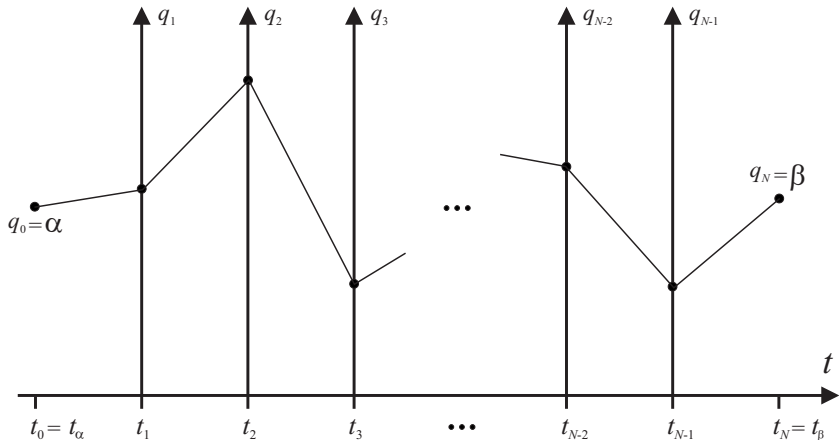
$$A(\alpha, \beta; T) = \int dq_1 \cdots dq_{N-1} A(\alpha, q_1; \epsilon) \cdots A(q_{N-1}, \beta; \epsilon),$$

koji se dobija podelom evolucije na N koraka dužine $\epsilon = T/N$ i umetanjem $N - 1$ rezolucije jedinice između dobijenih kratkovremenih evolucionih operatora. Ovaj izraz je egzaktn.

- Sledeći korak je aproksimativno računanje kratkovremenih amplituda do prvog reda po ϵ , odakle se dobija ($\hbar = 1$)

$$A_N(\alpha, \beta; T) = \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{N/2}} \int dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-S_N}$$

Ilustracija diskretizacije trajektorija





Funktionalni formalizam (4)

- Kontinualna amplituda $A(\alpha, \beta; T)$ se dobija u limesu $N \rightarrow \infty$ diskretizovane amplitude $A_N(\alpha, \beta; T)$,

$$A(\alpha, \beta; T) = \lim_{N \rightarrow \infty} A_N(\alpha, \beta; T)$$

- Diskretizovana amplituda A_N je izražena kao višestruki integral od e^{-S_N} , gde je S_N diskretizovano dejstvo
- Za teoriju definisanu lagranžijanom $L = \frac{1}{2} \dot{q}^2 + V(q)$, (naivno) diskretizovano dejstvo je dato izrazom

$$S_N = \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\delta_n^2}{2\epsilon} + \epsilon V(\bar{q}_n) \right),$$

gde je $\delta_n = q_{n+1} - q_n$, $\bar{q}_n = \frac{q_{n+1} + q_n}{2}$.



Numerički pristup računanju funkcionalnih integrala (1)

- Funkcionalni formalizam je praktično idealno formulisan za numerički pristup, a fizičke veličine su date preko diskretizovanih izraza, kao višestruki integrali oblika

$$\int dq_1 \cdots dq_{N-1} e^{-S_N}$$

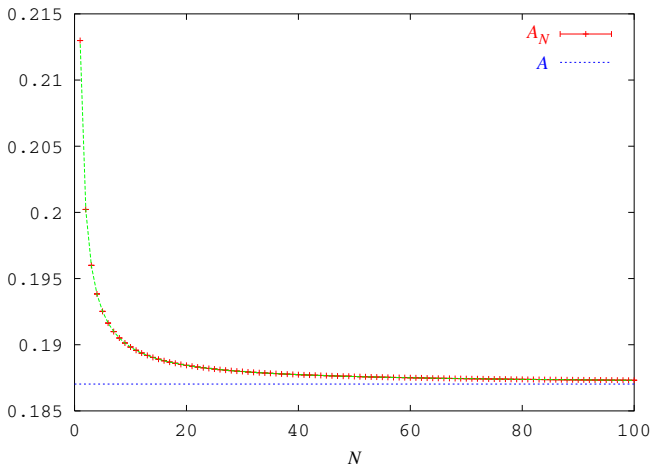
- Monte Karlo (MC) metod za numeričku integraciju dominira nad drugim metodama za integrale visoke dimenzionalnosti
- Međutim, iako višestruki integrali mogu da se izračunaju veoma tačno i efikasno pomoću MC metoda, ostaje težak $N \rightarrow \infty$ limes
- Ovo je slaba tačka izložene konstruktivne definicije funkcionalnih integrala za praktične primene



Numerički pristup računanju funkcionalnih integrala (2)

- Diskretizacija koju smo koristili za definisanje funkcionalnih integrala nije jedinstvena; zapravo, izbor diskretizacije je od *ključnog* značaja
- Naivno diskretizovano dejstvo u preskripciji srednje tačke daje diskretizovane amplitude koje konvergiraju kontinualnim vrednostima brzinom $1/N$
- Pomoću specijalnih trikova može se dobiti nešto brža konvergencija (na primer, leva preskripcija daje $1/N^2$ konvergenciju pri računanju particione funkcije)
- Međutim, ovo ne može da se uradi na sistematski način, niti je primenljivo u svim slučajevima (leva preskripcija ne može da se koristi za sisteme sa nejednoznačnostima u uređenju)

Tipična $1/N$ konvergencija naivno diskretizovanih funkcionalnih integrala





Diskretizovana efektivna dejstva (1)

- Diskretizovana dejstva mogu da se klasifikuju prema brzini konvergencije odgovarajućih diskretizovanih funkcionalnih integrala ka kontinuum vrednostima
- Moguće je uvesti različita diskretizovana dejstva, koja sadrže dodatne članove u odnosu na naivno diskretizovano dejstvo
- Ovi dodatni članovi moraju da iščezavaju u $N \rightarrow \infty$ limesu, i ne smeju da menjaju kontinuum vrednosti amplituda; na primer

$$\sum_{n=0}^{N-1} \epsilon^3 V'(\bar{q}_n) \rightarrow \epsilon^2 \int_0^T dt V'(q(t)) \rightarrow 0$$

- Dodatni članovi u diskretizovanim dejstvima se biraju tako da poprave brzinu konvergencije funkcionalnih integrala



Diskretizovana efektivna dejstva (2)

- Ovakva popravljena diskretizovana dejstva su ranije konstruisana u okviru raznih pristupa, uključujući
 - uopštenja Trotter-Suzuki formule
 - popravke kratkovremene propagacije
 - razvoj propagatora u red po broju izvoda potencijala
- Ovo je popravilo konvergenciju opštih funkcionalnih integrala za particione funkcije sa $1/N$ na $1/N^4$
- Li-Broughton efektivni potencijal

$$V^{LB} = V + \frac{1}{24}\epsilon^2 V'^2 .$$

u levoj preskripciji daje $1/N^4$ konvergenciju

- Izvođenje iz uopštene Trotterove formule koristi cikličnu osobinu traga - $1/N^4$ konvergencija se dobija samo za particionu funkciju



Diskretizovana efektivna dejstva (3)

- Pristup koji je razvijen u okviru naših istraživanja omogućava značajno ubzavanje konvergencije funkcionalnih integrala kroz proučavanje veze između različitih diskretizacija
- Na osnovu ovoga je izvedena integralna jednačine koja povezuje diskretizovana efektivna dejstva i omogućava njihovo sistematsko izračunavanje, što je dalo popravljenu $1/N^p$ konvergenciju funkcionalnih integrala za jednočestične sisteme u $d = 1$
- Nakon toga su razvijeni ekvivalentni pristupi koji su omogućili uopštavanje dobijenih rezultata na višestetične sisteme u proizvoljnom broju dimenzija



Idealna diskretizacija (1)

- Idealno diskretizovano dejstvo S^* bi davalo egzaktne kontinualne amplitude $A_N = A$ za sve diskretizacije N
- Za slobodnu česticu, naivno i idealno diskretizovano dejstvo se poklapaju
- Iz relacije kompletnosti

$$A(\alpha, \beta; T) = \int dq_1 \cdots dq_{N-1} A(\alpha, q_1; \epsilon) \cdots A(q_{N-1}, \beta; \epsilon),$$

sledi da je idealno diskretizovano dejstvo S_n^* za vreme propagacije ϵ dato sa

$$A(q_n, q_{n+1}; \epsilon) = (2\pi\epsilon)^{-\frac{1}{2}} e^{-S_n^*}$$

- Idealno diskretizovano dejstvo S^* je suma izraza S_n^*



Idealna diskretizacija (2)

- U opštem slučaju se idealno diskretizovano dejstvo može napisati u obliku

$$S_n^* = \frac{\delta_n^2}{2\epsilon} + \epsilon W_n,$$

gde je W efektivni potencijal u kome se, pored $V(\bar{q}_n)$, nalaze i sve popravke

- Iz definicije idealnog diskretizovanog dejstva sledi

$$W_n = W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon)$$

- Iz realnosti amplituda u imaginarnom vremenu, odnosno iz njihove hermitskosti u realnom vremenu sledi

$$W(\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon) = W(-\delta_n, \bar{q}_n; \epsilon)$$



Rekurzivni pristup za višestestične sisteme

- Polazimo od Šredingerove jednačine za amplitudu prelaza $A(q, q'; \epsilon)$ za sistem M nerelativističkih čestica u d prostornih dimenzija

$$\left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \Delta_i + V(q) \right] A(q, q'; \epsilon) = 0$$
$$\left[\frac{\partial}{\partial \epsilon} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \Delta'_i + V(q') \right] A(q, q'; \epsilon) = 0$$

- Ovde su Δ_i i Δ'_i d -dimenzionalni laplasijani po početnim i krajnjim koordinatama čestice i , dok su q i q' vektori dimenzije $d \times M$ i reprezentuju položaje svih čestica u početnom i krajnjem trenutku propagacije



Jednačina za idealni efektivni potencijal

- Nakon zamene kratkovremene amplitude $A(q, q'; \epsilon)$ izražene preko idealnog diskretizovanog efektivnog potencijala W

$$A(q, q'; \epsilon) = \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{dM/2}} \exp \left[-\frac{\delta^2}{2\epsilon} - \epsilon W \right]$$

dobijamo jednačinu za efektivni potencijal, izraženu preko $x = \delta/2$, $\bar{x} = (q + q')/2$, $V_{\pm} = V(\bar{x} \pm x)$

$$W + x \cdot \partial W + \epsilon \frac{\partial W}{\partial \epsilon} - \frac{1}{8} \epsilon \bar{\partial}^2 W - \frac{1}{8} \epsilon \partial^2 W + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\bar{\partial} W)^2 + \frac{1}{8} \epsilon^2 (\partial W)^2 = \frac{V_+ + V_-}{2}$$



Rekurzivne relacije (1)

- Efektivni potencijal je dat pomoću razvoja u red

$$W(x, \bar{x}; \epsilon) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=0}^m W_{m,k}(x, \bar{x}) \epsilon^{m-k}$$

gde je

$$W_{m,k}(x, \bar{x}) = x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_{2k}} c_{m,k}^{i_1, \dots, i_{2k}}(\bar{x})$$

- Koeficijenti $W_{m,k}$ se dobijaju iz rekurzivnih relacija

$$\begin{aligned} 8(m+k+1)W_{m,k} &= \bar{\partial}^2 W_{m-1,k} + \partial^2 W_{m,k+1} - \\ &\quad - \sum_{l=0}^{m-2} \sum_r (\bar{\partial} W_{l,r}) \cdot (\bar{\partial} W_{m-l-2,k-r}) - \\ &\quad - \sum_{l=1}^{m-2} \sum_r (\partial W_{l,r}) \cdot (\partial W_{m-l-1,k-r+1}) \end{aligned}$$

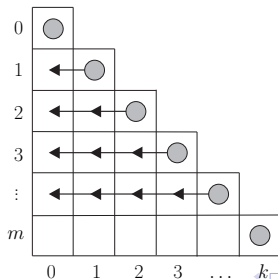


Rekurzivne relacije (2)

- Dijagonalni koeficijenti se jednostavno dobijaju iz rekurzivnih relacija

$$W_{m,m} = \frac{1}{(2m+1)!} (x \cdot \bar{\partial})^{2m} V$$

- Vandijagonalni koeficijenti se dobijaju rešavanjem rekurzivni relacija sledećim redosledom





Efektivna dejstva za višečestične sisteme

- Na nivou $p = 3$, efektivno dejstvo je određeno sa

$$W_{0,0} = V$$

$$W_{1,1} = \frac{1}{6} (x \cdot \bar{\partial})^2 V$$

$$W_{1,0} = \frac{1}{12} \bar{\partial}^2 V$$

$$W_{2,2} = \frac{1}{120} (x \cdot \bar{\partial})^4 V$$

$$W_{2,1} = \frac{1}{120} (x \cdot \bar{\partial})^2 \bar{\partial}^2 V$$

$$W_{2,0} = \frac{1}{240} \bar{\partial}^4 V - \frac{1}{24} (\bar{\partial} V) \cdot (\bar{\partial} V)$$

Dijagramatski prikaz efektivnih dejstava (1)

- Izvedene rekurzivne relacije se mogu prikazati i u dijagramatskom obliku, ako uvedemo

$$\delta_{ij} = i \text{ — } j, \quad \mathcal{X}_i = \times \text{ — } i$$

$$\bar{\partial}_{i_1} \bar{\partial}_{i_2} \cdots \bar{\partial}_{i_l} V = \text{diagram of a black circle with } l \text{ legs labeled } i_1, i_2, \dots, i_l,$$

$$W_{m,k} = \text{diagram of a grey box labeled } m, k \text{ with } k \text{ legs labeled } x, \dots, x \text{ under a brace labeled } 2k.$$

- Dijagramatski oblik dijagonalnih koeficijenata

$$W_{m,m} = \text{diagram of a grey box labeled } m, m \text{ with } m \text{ legs labeled } x, \dots, x \text{ under a brace labeled } 2m} = \frac{1}{(2m+1)!} \text{diagram of a black circle with } m \text{ legs labeled } x, \dots, x \text{ under a brace labeled } 2m}.$$

Dijagramatski prikaz efektivnih dejstava (2)

- Dijagramatski oblik rekurzivnih relacija

$$s(m+k+1) \begin{array}{|c|} \hline m, k \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline m-1, k \\ \hline \end{array} + (2k+2)(2k+1) \begin{array}{|c|} \hline m, k+1 \\ \hline \end{array} - \\
 - \sum_{l=0}^{m-2} \sum_r \begin{array}{|c|} \hline l, r \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline m-l-2, k-r \\ \hline \end{array} - \sum_{l=1}^{m-2} \sum_r 2r(2k-2r+2) \begin{array}{|c|} \hline l, r \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline m-l-1, k-r+1 \\ \hline \end{array} .$$

- Rešenja do nivoa $p = 3$

$$W_{0,0} = \bullet,$$

$$W_{1,1} = \frac{1}{6} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{6} (1)^2,$$

$$W_{1,0} = \frac{1}{12} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{12} (11),$$

$$W_{2,2} = \frac{1}{120} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{120} (1)^4,$$

$$W_{2,1} = \frac{1}{120} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{120} (1)^2(11),$$

$$W_{2,0} = \frac{1}{240} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} - \frac{1}{24} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} \\
 = \frac{1}{240} (11)^2 - \frac{1}{24} (12),$$

$$W_{3,3} = \frac{1}{5040} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{5040} (1)^6,$$

$$W_{3,2} = \frac{1}{3360} \begin{array}{|c|} \hline \bullet \\ \hline \end{array} = \frac{1}{3360} (1)^4(11),$$



Jednočestična slika (1)

- Dobra aproksimacija za slabo interagujuće / retke gasove
- Višečestična stanja se dobijaju iz jednočestičnih stanja
 - Boze statistika, identične čestice
- Višečestični spektar se dobija iz jednočestičnog spektra
- U okviru velikog kanonskog ansambla, particiona funkcija idealnog Boze gasa je

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\nu\}} e^{-\beta(E_{\{\nu\}} - \mu N_{\{\nu\}})}$$

gde je

$$E_{\{\nu\}} = \sum_i N_i E_i, \quad N_{\{\nu\}} = \sum_i N_i$$

a N_i je naseljenost i -tog jednočestičnog energetskog nivoa



Jednočestična slika (2)

- Particiona funkcija može da se izrazi preko jednočestičnog spektra

$$\mathcal{Z} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_i - \mu)}}$$

Slobodna energija je data sa

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} = \frac{1}{\beta} \sum_i \ln(1 - e^{-\beta(E_i - \mu)}) = -\frac{1}{\beta} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{m\beta\mu}}{m} \mathcal{Z}_1(m, \beta)$$

gde je $\mathcal{Z}_1(m, \beta)$ jednočestična particiona funkcija

- Broj čestica se može izraziti kao

$$N = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu} = \sum_{m=1}^{\infty} (e^{m\beta\mu} \mathcal{Z}_1(m, \beta) - 1)$$



Boze-Ajnštajn raspodela

- Srednji broj čestica na nivou i je

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\nu\}} N_i e^{-\beta(E_{\{\nu\}} - \mu N_{\{\nu\}})}$$

- Posle krećeg računa dobija se

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} - 1}$$

- Ovo je Boze-Ajnštajn raspodela, koja opisuje
 - idealne i slabo interagujuće bozonske gasove
 - nisko-temperaturno ponašanje bozona malih gustina



Boze-Ajnštajn kondenzacija

- Fazni prelaz makroskopskog broja bozona u osnovno stanje na niskim temperaturama (T_c)
- Fenomen predviđen još 1924. godine u radovima Bozea i Ajnštajna
- Makroskopski kvantni fenomen koji leži u osnovi
 - superfluidnosti
 - niskotemperaturne superprovodnosti
- Eksperimentalna potvrda Boze-Ajnštajn kondenzacije 1995. godine
 - Cornell and Wiemann, Boulder (^{87}Rb)
 - Ketterle, MIT (^{23}Na)



Ekperimenti sa Boze-Ajnštajn kondenzatima

- Kondenzati se obično realizuju u harmonijskim magneto-optičkim zamkama, na temperaturama od nekoliko desetina nK
- Brzo rotirajući kondenzati su intenzivno proučavani, pošto su ekscitacije kondenzata pri rotaciji jedan od ključnih znakova superfluidnosti
- Pariska grupa (J. Dalibard) je u eksperimentima postigla kritičnu rotaciju Boze-Ajnštajn kondenzata koji se sastojao od $3 \cdot 10^5$ atoma ^{87}Rb u aksijalno simetričnoj zamci - mi modeliramo ovaj eksperiment
- Mali kvartični anharmonicitet (samo u $x - y$ ravni) je iskorišćen da bi se kondenzat zadržao u zamci čak i pri kritičnoj rotaciji [PRL **92**, 050403 (2004)]



Numerički pristup (1)

- Izvedena diskretizovana efektivna dejstva se mogu primeniti za proučavanje osobina (brzo rotirajućih) Boze-Ajnštajn kondenzata
- Prvi korak je računanje velikog broja svojstvenih stanja i vrednosti jednočestičnog hamiltonijana
- Nakon toga je moguće izračunati globalne osobine kondenzata
 - T_c kao funkciju rotacione frekvencije Ω
 - naseljenost osnovnog stanja N_0/N kao funkciju temperature
- Takođe se mogu izračunati gustine čestica u kondenzatu koje se mere u time-of-flight eksperimentima
- $V_{BEC} = \frac{M}{2}(\omega_{\perp}^2 - \Omega^2)r_{\perp}^2 + \frac{M}{2}\omega_z^2 z^2 + \frac{k}{4}r_{\perp}^4$, $\omega_{\perp} = 2\pi \times 64.8$ Hz, $\omega_z = 2\pi \times 11.0$ Hz, $k = 2.6 \times 10^{-11}$ Jm⁻⁴



Numerički pristup (2)

- Uobičajeno je da se osnovno stanje kondenzata razmatra posebno, a da se hemijski potencijal μ ispod kondenzacione temperature fiksira na energiju osnovnog stanja, $\mu = E_0$
- Ispod kondenzacione temperature imamo

$$N = N_0 + \sum_{m=1}^{\infty} (e^{m\beta E_0} \mathcal{Z}_1(m\beta) - 1)$$

- Kondenzaciona temperatura T_c se definiše uslovom:

$$N_0 = N - \sum_{m=1}^{\infty} (e^{m\beta_c E_0} \mathcal{Z}_1(m\beta_c) - 1) = 0$$

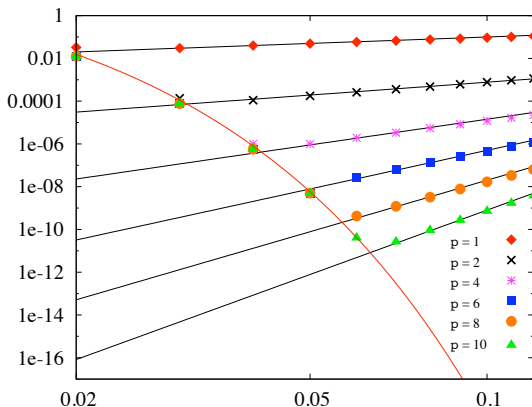


Jednočestična svojstvena stanja (1)

- Jednočestična svojstvena stanja i vrednosti (spektar) su dovoljni za određivanje kondenzacione temperature
- Najefikasniji pristup za niskodimenzionalne sisteme je direktna dijagonalizacija prostorno diskretizovanog operatora $e^{-\epsilon\hat{H}}$, gde je ϵ pogodno odabrano (veštačko) vreme propagacije ($N = 1$ aproksimacija)
- Na datom prostornom gridu, matrični elementi operatora $e^{-\epsilon\hat{H}}$ su kratkovremene amplitude
- Ako je $\epsilon < 1$, amplitude mogu analitički da se izračunaju iz prethodno izvedenih efektivnih dejstava, korišćenjem izraza sa visokim nivoom konvergencije p
- Dobijene svojstvene vrednosti biće $e^{-\epsilon E_n}$, a svojstveni vektori će biti prostorno diskretizovani svojstveni vektori jednočestičnog hamiltonijana ψ_n



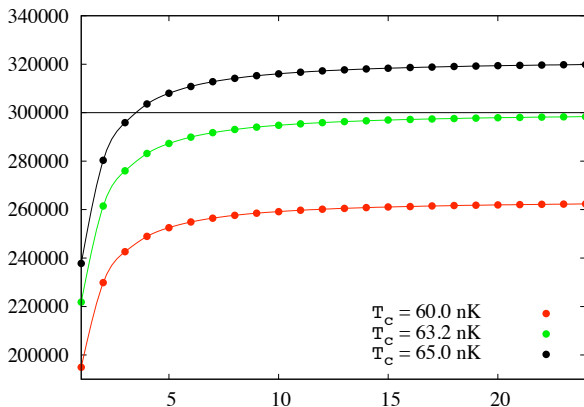
Jednočestična svojstvena stanja (2)



Odstupanja od egzaktne energije osnovnog stanja u funkciji od ϵ za V_{BEC} (kritična rotacija). Greška je proporcionalna sa ϵ^p . Crvena kriva je diskretizaciona greška (analitički poznata).

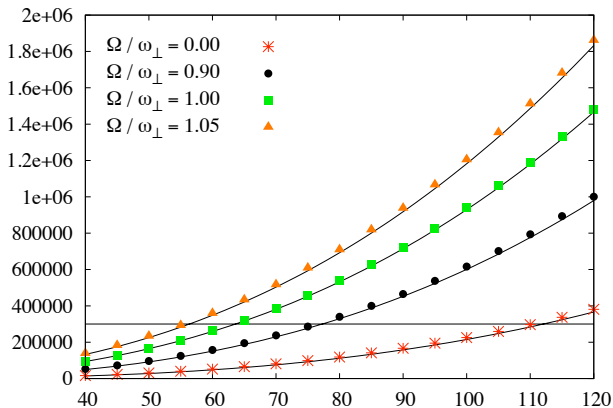


Kondenzaciona temperatura (1)



Parcijalna suma $\sum_{m=1}^M (e^{m\beta E_0} \mathcal{Z}_1(m, \beta) - 1)$ kao funkcija od M za kritičnu rotaciju, dobijena sa $p = 18$ efektivnim dejstvom.

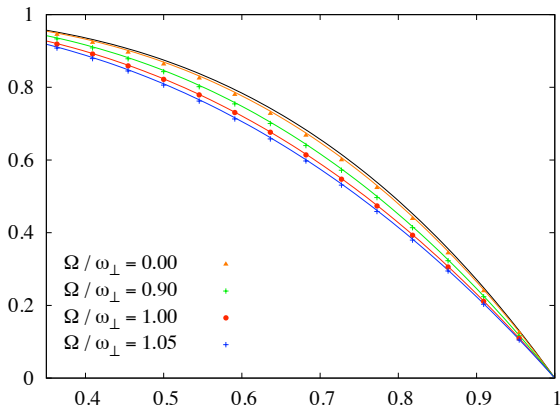
Kondenzaciona temperatura (2)



Broj čestica kao funkcija T_c [nK] za različite rotacione frekvencije ($p = 18$ efektivno dejstvo).



Naseljenost osnovnog nivoa



Naseljenost osnovnog nivoa N_0/N kao funkcija od T/T_c^0 za različite rotacione frekvencije ($p = 18$ efektivno dejstvo, $T_c^0 = 110$ nK je korišćeno kao tipična temperaturna skala).



Računanje globalnih osobina kondenzata

- E_n može da se dobije iz direktne dijagonalizacije, a jednočestične particione funkcije se mogu izračunati kao

$$\mathcal{Z}_1(m, \beta) = \sum_n e^{-m\beta E_n}$$

- Ovo je primenljivo za niske temperature, kada se viši energetski nivoi (koji se ne dobijaju pri dijagonalizaciji - ona uvek daje samo ograničeni broj energetskih nivoa) mogu zanemariti
- Za nešto više temperature, \mathcal{Z}_1 se može numerički odrediti kao suma dijagonalnih amplituda (trag), a energija osnovnog stanja se može naći iz slobodne energije



Prostorna gustina čestica u kondenzatu (1)

- Prostorna gustina čestica u kondenzatu je data preko jednočestične matrice gustine $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\Psi}(\vec{r}_2) \rangle$ kao dijagonalni element, $n(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r})$
- Za idealne Boze gasove, gustina čestica može da se napiše u obliku

$$n(\vec{r}) = N_0 |\psi_0(\vec{r})|^2 + \sum_{n \geq 1} N_n |\psi_n(\vec{r})|^2$$

gde drugi član predstavlja gustinu čestica u termalnim stanjima ($n > 0$)

- Vektori ψ_n predstavljaju jednočestična svojstvena stanja, a naseljenosti nivoa N_n su date Boze-Ajnštajnovom raspodelom za $n \geq 1$,

$$N_n = \frac{1}{e^{\beta(E_n - E_0)} - 1}$$



Prostorna gustina čestica u kondenzatu (2)

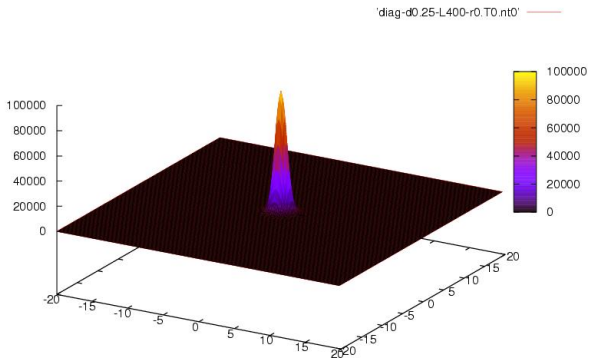
- Ako iskoristimo kumulantni razvoj (kao i kod računja broja čestica) i spektralnu dekompoziciju amplituda, gustina čestica može da se napiše i kao

$$n(\vec{r}) = N_0 |\psi_0(\vec{r})|^2 + \sum_{m \geq 1} \left[e^{m\beta E_0} A(\vec{r}, 0; \vec{r}, m\beta\hbar) - |\psi_0(\vec{r})|^2 \right]$$

gde je $A(\vec{r}, 0; \vec{r}, m\beta\hbar)$ amplituda (u imaginarnom vremenu) za jednočestični prelazak iz položaja \vec{r} u trenutku $t = 0$ u isti položaj \vec{r} u trenutku $t = m\beta\hbar$

- Obe definicije su matematički ekvivalentne
- Prva se koristi za veoma niske temperature, a druga za srednje temperature (bliske kritičnoj)

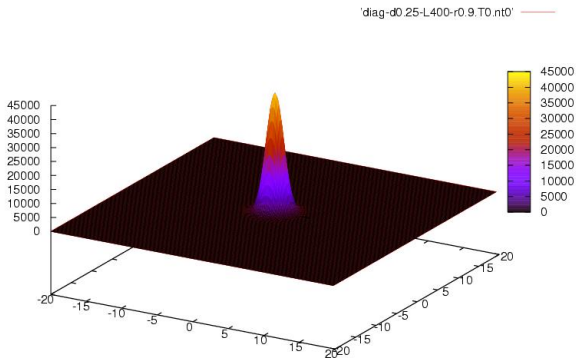
Prostorna gustina čestica u kondenzatu (3)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$ nK (bez rotacije, $\Omega/\omega_{\perp} = 0$). Linearna dimenzija profila je $67 \mu\text{m}$.



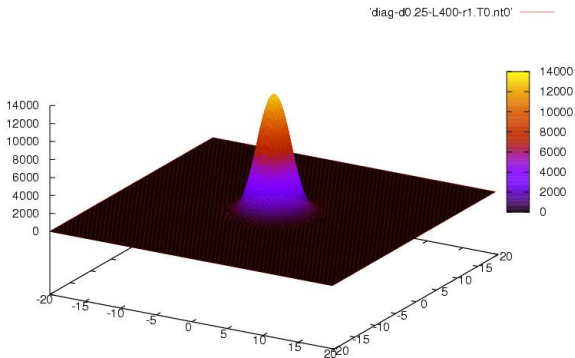
Prostorna gustina čestica u kondenzatu (4)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$
(potkritična rotacija, $\Omega/\omega_{\perp} = 0.9$). Linearna dimenzija $67 \mu\text{m}$.



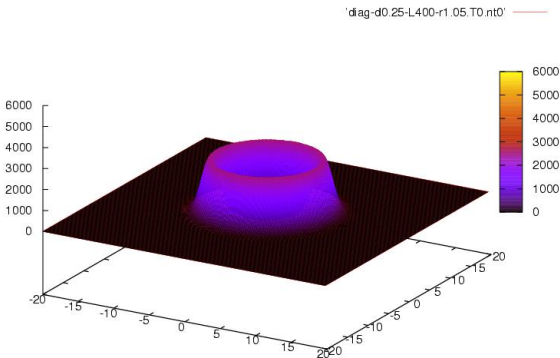
Prostorna gustina čestica u kondenzatu (5)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$ (kritična rotacija, $\Omega/\omega_{\perp} = 1$). Linearna dimenzija $67 \mu\text{m}$.



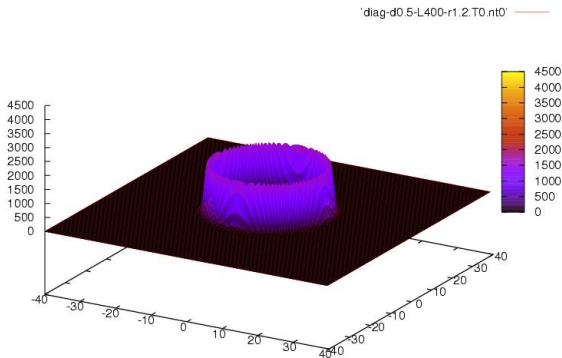
Prostorna gustina čestica u kondenzatu (6)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$
(natkrična rotacija, $\Omega/\omega_{\perp} = 1.05$). Linearna dimenzija $67 \mu\text{m}$.



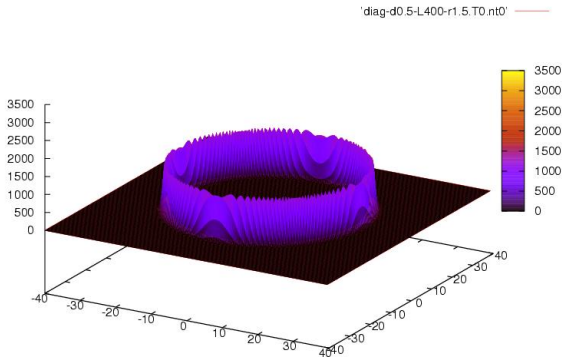
Prostorna gustina čestica u kondenzatu (7)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$
(natkrična rotacija, $\Omega/\omega_{\perp} = 1.2$). Linearna dimenzija $134 \mu\text{m}$.



Prostorna gustina čestica u kondenzatu (8)



Gustina čestica u kondenzatu u $x - y$ ravni za $T = 0$
(natkrična rotacija, $\Omega/\omega_{\perp} = 1.5$). Linearna dimenzija $134 \mu\text{m}$.



Time-of-flight merjenja raspodele čestica (1)

- U tipičnim eksperimentima sa Boze-Ajnštajn kondenzatima, potencijal zamke se isključi u trenutku $t = 0$ i gas se pusti da se slobodno širi kratko vreme t reda veličine nekoliko desetina milisekundi (time of flight)
- Nakon toga se napravi apsorpciona slika i dobije se raspodela gustine čestica u ravni normalnoj na laserski snop
- Za idealni Boze kondenzat, gustina čestica nakon vremena t je data sa

$$n(\vec{r}, t) = N_0 |\psi_0(\vec{r}, t)|^2 + \sum_{n \geq 1} N_n |\psi_n(\vec{r}, t)|^2$$

gde je

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 \vec{k} d^3 \vec{R}}{(2\pi)^3} e^{-i\omega_{\vec{k}} t + i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_n(\vec{R})$$



Time-of-flight merenja raspodele čestica (2)

- Za srednje temperature (oko kritične) može da se iskoristi druga, matematički ekvivalentna definicija

$$n(\vec{r}, t) = N_0 |\psi_0(\vec{r}, t)|^2 + \sum_{m \geq 1} \left[e^{m\beta E_0} \int \frac{d^3 \vec{k}_1 d^3 \vec{k}_2 d^3 \vec{R}_1 d^3 \vec{R}_2}{(2\pi)^6} \times \right. \\ \left. e^{-i(\omega_{\vec{k}_1} - \omega_{\vec{k}_2})t + i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r} - i\vec{k}_1 \cdot \vec{R}_1 + i\vec{k}_2 \cdot \vec{R}_2} A(\vec{R}_1, 0; \vec{R}_2, m\beta\hbar) - |\psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right]$$

- U oba pristupa neophodno je prvo izračunati energiju osnovnog stanja i odgovarajući svojstveni vektor, koristeći direktnu dijagonalizaciju ili neki drugi metod
- FFT je idealan za numeričko računanje time-of-flight raspodela



Time-of-flight merenja raspodele čestica (3)

(Loading diag-d025-L400-r0T0.mpg)

Vremenska evolucija raspodele čestica u $x - y$ ravni za kondenzat bez rotacije ($\Omega/\omega_{\perp} = 0$) na $T = 0$. Linearna dimenzija profila je $67 \mu\text{m}$.



Time-of-flight merenja raspodele čestica (4)

(Loading diag-d025-L400-r09T0.mpg)

Vremenska evolucija raspodele čestica u $x - y$ ravni za kondenzat sa potkritičnom rotacijom ($\Omega/\omega_{\perp} = 0.9$) na $T = 0$. Linearna dimenzija profila je $67 \mu\text{m}$.



Time-of-flight merjenja raspodele čestica (5)

(Loading diag-d025-L400-r1T0.mpg)

Vremenska evolucija raspodele čestica u $x - y$ ravni za kondenzat sa kritičnom rotacijom ($\Omega/\omega_{\perp} = 1$) na $T = 0$.
Linearna dimenzija profila je $67 \mu\text{m}$.



Time-of-flight merenja raspodele čestica (6)

(Loading diag-d025-L400-r105T0.mpg)

Vremenska evolucija raspodele čestica u $x - y$ ravni za kondenzat sa natkritičnom rotacijom ($\Omega/\omega_{\perp} = 1.05$) na $T = 0$. Linearna dimenzija profila je $67 \mu\text{m}$.



Time-of-flight merenja raspodele čestica (7)

(Loading diag-d05-L400-r15T0.mpg)

Vremenska evolucija raspodele čestica u $x - y$ ravni za kondenzat sa natkritičnom rotacijom ($\Omega/\omega_{\perp} = 1.5$) na $T = 0$. Linearna dimenzija profila je $134 \mu\text{m}$.



Zaključak (1)

- Uveden je novi metod za računanje funkcionalnih integrala za opštu nerelativističku višečestičnu kvantnu teoriju
- Izvedena su diskretizovana efektivna dejstva koja omogućavaju da analitički bolje razumemo suštinu funkcionalnog formalizma
- Numerički, diskretizovana efektivna dejstva nivoa p daju suštinsko ubrzanje Monte Karlo algoritma na $1/N^p$
- Za jednočestične teorije izvedena su diskretizovana dejstva do nivoa $p = 35$, a za opštu višečestičnu teoriju do $p = 10$
- Za specijalne slučajeve potencijala izvedena su efektivna dejstva višeg nivoa ($p = 140$ za kvartični anharmonijski potencijal u $d = 1$, $p = 67$ u $d = 2$, $p = 37$ za modifikovani Pöschl-Teller potencijal)



Zaključak (2)

- Razvijene su Monte Karlo simulacije i izvedena je ekstenzivna numerička analiza kojom su verifikovani dobijeni analitički rezultati
- Razvijeni su *Mathematica* kodovi koji su omogućili automatizovanje simboličkog izvođenja diskretizovanih dejstava za visoke nivoe p
- Izvedena efektivna dejstva su primenjena za numeričko proučavanje (brzo rotirajućih) Boze-Ajnštajn kondenzata
- Svojstvena stanja i spektar jednočestičnog hamiltonijana dobijen je egzaktnom dijagonalizacijom
- Izračunata je kondenzaciona temperatura i naseljenost osnovnog nivoa kao funkcija brzine rotacije
- Izračunati su profili prostorne raspodele gustine čestica u kondenzatu koji se dobijaju u time-of-flight merenjima



Trenutni i budući istraživački problemi

- Proučavanje osnovnog stanja nisko-dimenzionalnih kvantnih sistema
- Osobine interagujućih Boze-Ajnštajn kondenzata
 - Gross-Pitaevskii (mean-field) jednačina
 - Efektivna dejstva za vremenski zavisne potencijale
 - Formiranje i evolucija vorteksa u kondenzatu
- Kvantni gasovi na niskim temperaturama u potencijalima sa neuređenošću (disordered potentials), Andersonova lokalizacija
- Popravljeni estimatori za očekivane vrednosti (toplotni kapacitet, magnetizacija)



Reference

- A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, PRL **94**, 180403 (2005)
- A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, PLA **344**, 84 (2005)
- A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, PRB **72**, 064302 (2005)
- A. Bogojević, A. Balaž, A. Belić, PRE **72**, 036128 (2005)
- D. Stojiljković, A. Bogojević, A. Balaž, PLA **360**, 205 (2006)
- J. Grujić, A. Bogojević, A. Balaž, PLA **360**, 217 (2006)
- A. Bogojević, I. Vidanović, A. Balaž, A. Belić, PLA **372**, 3341 (2008)
- A. Balaž, A. Bogojević, I. Vidanović, A. Pelster, PRE **79**, 036701 (2009)



Saradnici

- dr Aleksandar Bogojević
- dr Aleksandar Belić
- Ivana Vidanović
- Danica Stojiljković
- Jelena Grujić
- dr Axel Pelster



Efektivno diskretizovano dejstvo, $p=4$

$$\begin{aligned}
 S_N^{(p=4)} = & \sum \left\{ \epsilon \left(\frac{1}{2} \frac{\delta_i \delta_i}{\epsilon^2} + V \right) \right. \\
 & + \frac{\epsilon^2}{12} \partial_{k,k}^2 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j}{24} \partial_{i,j}^2 V \\
 & - \frac{\epsilon^3}{24} \partial_i V \partial_i V + \frac{\epsilon^3}{240} \partial_{i,i,j,j}^4 V + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j}{480} \partial_{i,j,k,k}^4 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{1920} \partial_{i,j,k,l}^4 V \\
 & + \frac{\epsilon^4}{6720} \partial_{i,i,j,j,k,k}^6 V - \frac{\epsilon^4}{120} \partial_i V \partial_{i,k,k}^3 V - \frac{\epsilon^4}{360} \partial_{i,j}^2 V \partial_{i,j}^2 V \\
 & - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{480} \partial_k V \partial_{k,i,j}^3 V + \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{13440} \partial_{i,j,k,k,l,l}^6 V - \frac{\epsilon^3 \delta_i \delta_j}{1440} \partial_{i,k}^2 V \partial_{k,j}^2 V \\
 & \left. + \frac{\epsilon^2 \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l}{53760} \partial_{i,j,k,l,m,m}^6 V + \frac{\epsilon \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \delta_m \delta_n}{322560} \partial_{i,j,k,l,m,n}^6 V \right\}
 \end{aligned}$$