

ΣΠΙΝΟΡΙΑΚΟ ΣΥΜΠΥΚΝΩΜΑ BOSE-EINSTEIN

Διπλωματική Εργασία
Τομέας Πυρηνικής Φυσικής και Φυσικής Στοιχειωδών Σωματιδίων
Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης

Υπεύθυνος Καθηγητής: κ. Φώτης Διάκονος

Μεταξάς Μάριος

8 Νοεμβρίου 2012

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	i
Κατάλογος σχημάτων	1
Ευχαριστίες	3
Περίληψη	5
1 Δεύτερη Κβάντωση	7
1.1 Χώρος Καταστάσεων n Σωματιδίων	7
1.2 Χώρος Fock	10
1.3 Τελεστές Καταστροφής και Δημιουργίας	12
1.3.1 Βάση Αριθμών Κατάληψης	15
1.3.2 Τελεστές Πεδίου	16
1.4 Χρήσιμοι Τελεστές	18
1.4.1 Τελεστές ενός σώματος	18
1.4.2 Τελεστές δύο σωμάτων	20
2 Γενική Διατύπωση Συμπυκνώματος	23
2.1 Πίνακας πυκνότητας ενός σώματος	23
2.2 Παράμετρος Τάξης	27
3 Ιδανικό Αέριο Μποζονίων	29
3.1 Ιδανικό αέριο και μεγαλοκανονική συλλογή	29
3.2 Ιδανικό αέριο σε κουτί	35
3.3 Ιδανικό αέριο παρουσία αρμονικού δυναμικού	39
4 Αέριο Μποζονίων με αλληλεπιδράσεις	43
4.1 Στοιχεία θεωρίας σκέδασης	43
4.2 Θεωρία Bogoliubov	46
4.2.1 Χαμηλής τάξης προσέγγιση	46

4.2.2	Ανώτερης τάξης προσέγγιση	48
4.3	Η Εξίσωση Gross–Pitaevskii	53
4.3.1	Γενικά χαρακτηριστικά	53
4.3.2	Θεμελιώδης κατάσταση	57
4.3.3	Σολιτόνια	58
5	Θεωρία Σπινωριακού Συμπυκνώματος	63
5.1	Μικροσκοπική θεωρία	63
5.2	Πεπλεγμένες εξισώσεις Gross–Pitaevskii	66
5.2.1	Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Gross–Pitaevskii	67
5.2.1.1	Θεμελιώδης κατάσταση	69
5.2.1.2	Σολιτονικού τύπου λύσεις	71
6	Επίλογος και Συμπεράσματα	75
	Βιβλιογραφία	76

Κατάλογος Σχημάτων

3.1	Ο αριθμός των ατόμων εντός και εκτός του συμπυκνώματος σαν συνάρτηση του χημικού δυναμικού για καθορισμένη θερμοκρασία.	33
3.2	Ο λόγος συμπυκνώματος σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία για το ιδανικό αέριο μποζονίων.	37
4.1	Πυκνότητα $n(x) = \Psi_0 ^2$ συμπυκνώματος στο όριο Thomas–Fermi σε μία διάσταση.	58
4.2	Πυκνότητες $\rho(x)$ για φωτεινό και σκοτεινό σολιτόνιο.	59
5.1	Διάγραμμα της μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1(x) = \psi_{-1}(x) = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}(x)}{2}}$	70
5.2	Διάγραμμα μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1(x) = \psi_{-1}(x) = 0$ και $\psi_0(x) = \sqrt{\mu - V_{ext}(x)}$	71
5.3	Διάγραμμα μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1 = \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}}{2}}$ και $\psi_{-1} = 0$ για $\delta = 0$	72
5.4	Σολιτόνια στο κέντρο του δυναμικού παγίδευσης	73
5.5	Ταλάντωση σολιτονίων με $\delta = 0$. Η συχνότητα τους συμπίπτει με αυτή που υπολογίζουμε στα συμπυκνώματα μιας ή δύο συνιστωσών.	74

Ευχαριστίες

Από τη θέση αυτή θα ήθελα αρχικά να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα αναπληρωτή καθηγητή κ. Φώτη Διάκονο κυρίως για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε ως προς τη θεματολογία αλλά και για τις πολύτιμες υποδείξεις ώστε η παρούσα εργασία να είναι κατά το δυνατόν καλύτερη.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ακόμη τον καθηγητή κ. Δημήτρη Φραντζεσκάκη για τις συζητήσεις που είχαμε πάνω στη φυσική ιδιαίτερα στο τομέα των σολιτονίων αλλά και τον επίκουρο καθηγητή κ. Έκτορα Νισταζάκη για την γενικότερη υποστήριξη και βοήθεια που μου έδειξε κατά τη περίοδο που η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία όδευε στο τέλος της.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον υποψήφιο διδάκτορα κ. Βάσσο Αχιλλέως για την καθοριστική βοήθεια που μου παρείχε στο αριθμητικό τμήμα της παρούσας εργασίας. Χωρίς τη δική του συνεισφορά η εκπόνηση της εργασίας θα ήταν πολύ δυσκολότερη και ακόμα πιο χρονοβόρα.

Νιώθω ακόμα υποχρεωμένος να ευχαριστήσω όλους τους μεταπτυχιακούς φοιτητές του τομέα πυρηνικής φυσικής για τις συζητήσεις που είχαμε, οι οποίες έκαναν ευχάριστη τη παραμονή μου στο γραφείο του μεταδιδακτορικών ερευνητών του τρίτου ορόφου.

Τέλος, πάνω από όλα, οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ στην οικογένεια μου η οποία με στήριξε και με στηρίζει με όποιο τρόπο μπορεί διότι χωρίς αυτήν η παρούσα εργασία δεν θα υπήρχε. Η παρούσα εργασία είναι αφιερωμένη σε αυτή.

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία αποτελεί μια εισαγωγή στο συμπύκνωμα Bose–Einstein που δημιουργείται στα αραιά αέρια αλκαλίων με έμφαση στη μελέτη των συμπυκνωμάτων με εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας, όπως αυτού του σπιν. Ιδιαίτερο ρόλο στην ανάλυση μας διαδραματίζει η μη γραμμική διαφορική εξίσωση Gross–Piteavskii η οποία αποτελεί το θεωρητικό στοιχείο για την εξερεύνηση και τη κατανόηση των στατικών και δυναμικών χαρακτηριστικών των συμπυκνωμάτων.

Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζεται ο χώρος πολλών σωματιδίων ή αλλιώς ο χώρος Fock ο οποίος είναι εφοδιασμένος με τους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας των ατόμων. Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι τελεστές ενός σώματος και δύο σωμάτων οι οποίοι αποτελούν τους βασικούς τελεστές τόσο της ελεύθερης όσο και της αλληλεπιδρώσας θεωρίας διότι από τους τελεστές αυτούς προκύπτει η χαμιλτονιανή του συστήματος.

Στο δεύτερο κεφάλαιο δίνεται με εντελώς γενικό τρόπο ο ορισμός του συμπυκνώματος Bose–Einstein, με τη βοήθεια του πίνακα πυκνότητας ενός σώματος, η έννοια της προσέγγισης Bogoliubov καθώς και η έννοια της παραμέτρου τάξης του συμπυκνώματος.

Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζεται το ιδανικό αέριο μποζονίων. Το ιδανικό αέριο αποτελεί ένα φυσικό σύστημα το οποίο χάριν της απλότητας του, μας επιτρέπει να μελετήσουμε και να κατανοήσουμε την έννοια της συμπύκνωσης εντελώς αναλυτικά και να εξάγουμε χρήσιμα φυσικά απότελεσματα. Στο τέταρτο αναλύεται το αέριο μποζονίων με αλληλεπιδράσεις αρχικά στη περίπτωση που είναι ομογενές, οπότε και αναφέρεται η περιγραφή του Bogoliubov και στη συνέχεια όταν είναι μη ομογενές οπότε και για τη περιγραφή του χρησιμοποιείται η θεωρία του μέσου πεδίου μέσω της οποίας καταλήγουμε στην εξίσωση Gross–Piteavskii.

Τέλος στο τελευταίο κεφάλαιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας περιγράφεται το σπινωτικό συμπύκνωμα μποζονίων με σπίν 1, το οποίο χαρακτηρίζεται από διανυσματική παράμετρο τάξης. Το συμπύκνωμα πλέον περιγράφεται από τρεις πεπλεγμένες εξισώσεις Gross–Piteavskii μία για κάθε συνιστώσα του σπιν της υπέρλεπτης υφής. Εφαρμόζοντας

αριθμητικές μεθόδους καταφέρνουμε να λύσουμε τις εξισώσεις αυτές δοκιμάζοντας αρχικά λύσεις στο όριο Thomas–Fermi και στη συνέχεια λύσεις σολιτονικού τύπου καταγράφοντας ταυτόχρονα και τις διαφορές που παρουσιάζονται από το βαθμωτό συμπύκνωμα.

Κεφάλαιο 1

Δεύτερη Κβάντωση

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται εν συντομία η έννοια της δεύτερης κβάντωσης. Αρχικά ξεκινάμε από το χώρο καταστάσεων n μη διακρίσιμων σωματιδίων στη συνέχεια μεταβαίνουμε στο χώρο Fock στον οποίο ορίζουμε τους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας σωματιδίων και τέλος κατασκευάζουμε τους τελεστές ενός σώματος (one-body operators) και τελεστές δύο σωμάτων (two-body operators) οι οποίοι όπως θα διαπιστώσουμε παίζουν κυρίαρχο ρόλο στη μαθηματική περιγραφή του φυσικού μας συστήματος. Η παρουσίαση μας στο κεφάλαιο αυτό είναι γενική και αφορά τόσο τα μποζόνια όσο και τα φερμιονία.

1.1 Χώρος Καταστάσεων n Σωματιδίων

Ξεκινάμε θεωρώντας ότι το φυσικό σύστημα που μελετάμε αποτελείται από n μη διακρίσιμα σωματίδια. Από τη κβαντική μηχανική γνωρίζουμε ότι οι φυσικές καταστάσεις που περιγράφουν τα σωματίδια διαφέρουν ανάλογα με το είδος των σωματιδίων, έτσι σωματίδια τα οποία υπακούουν στη στατιστική Bose (Fermi) πρέπει να έχουν συμμετρικές (αντισυμμετρικές) φυσικές καταστάσεις ως προς τις μεταθέσεις των δεικτών $\{1, 2, \dots, n\}$. Για να μπορέσουμε να διαχειριστούμε ταυτόχρονα και τα δύο είδη σωματιδίων εισάγουμε έναν αριθμό ζ ο οποίος έχει τιμή $\zeta = +1$ αν αναφερόμαστε στα μποζόνια ή $\zeta = -1$ αν αναφερόμαστε στα φερμιονία. Συνεπώς η κατάσταση n σωματιδίων για τα οποία η αρίθμηση δεν παίζει κανένα ρόλο είναι [3]:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P \zeta^P |\psi_{P(1)}\rangle |\psi_{P(2)}\rangle \dots |\psi_{P(n)}\rangle \quad (1.1.1)$$

όπου η άθροιση εκτείνεται σε όλες τις $n!$ το πλήθος μεταθέσεις των δεικτών $\{1, 2, \dots, n\}$.

Για να είναι όμως ο χώρος καλά ορισμένος πρέπει να ορίσουμε και το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ δύο καταστάσεων της μορφής (1.1.1).

Έστω δύο φυσικές καταστάσεις $|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle = \sum_Q \zeta^Q |\psi_{Q(1)}\rangle |\psi_{Q(2)}\rangle \dots |\psi_{Q(n)}\rangle$ και $|\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\rangle = \sum_P \zeta^P |\varphi_{P(1)}\rangle |\varphi_{P(2)}\rangle \dots |\varphi_{P(n)}\rangle$ αντίστοιχα. Τότε δείχνεται [3] ότι το εσωτερικό γινόμενο των δύο αυτών καταστάσεων είναι ίσο με :

$$\langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \rangle = \sum_P \zeta^P \langle \varphi_1 | \psi_{P(1)} \rangle \langle \varphi_2 | \psi_{P(2)} \rangle \dots \langle \varphi_n | \psi_{P(n)} \rangle \quad (1.1.2)$$

Από τη γραμμική άλγεβρα όμως γνωρίζουμε ότι για κάθε $n \times n$ τετραγωνικό πίνακα B ισχύει:

$$|B|_\zeta = \left| \begin{pmatrix} B_{11} & \dots & B_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{n1} & \dots & B_{nn} \end{pmatrix} \right|_\zeta = \sum_P \zeta^P B_{1P(1)} B_{2P(2)} \dots B_{nP(n)} \quad (1.1.3)$$

άρα μπορούμε να γράψουμε:

$$\langle \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n | \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \rangle = \left| \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_1 | \psi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \varphi_n | \psi_n \rangle \end{pmatrix} \right|_\zeta \quad (1.1.4)$$

Αξίζει να παρατηρήσουμε ότι αν στη παραπάνω εξίσωση θέσουμε $\zeta = -1$ τότε παίρνουμε τη γνωστή μας ορίζουσα ενώ για $\zeta = +1$ παίρνουμε τη παραμένουσα η οποία έχει τους ίδιους όρους με την ορίζουσα αλλά όλους με θετικό πρόσημο.

Ο διανυσματικός χώρος που δημιουργείται από όλους τους γραμμικούς συνδυασμούς των διανυσμάτων της μορφής (1.1.1) εφοδιασμένος με εσωτερικό γινόμενο που δίνεται από τη σχέση (1.1.2) λέγεται χώρος καταστάσεων η μη διακρίσιμων σωματιδίων.

Σύστημα δύο ταυτόσημων μποζονίων: Για να εφαρμόσουμε το παραπάνω φορμαλισμό θεωρούμε το πολύ απλό σύστημα δύο μποζονίων. Έστω δύο καταστάσεις ενός σωματιδίου $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$. Τότε για τους δείκτες $\{1, 2\}$ υπάρχουν $2!$ το πλήθος μεταθέσεις οι οποίες είναι:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \kappa = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.5)$$

Με βάση τη σχέση (1.1.1) θα έχουμε:

$$|\psi_1, \psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[(+1)^\varepsilon |\psi_{\varepsilon(1)}\rangle |\psi_{\varepsilon(2)}\rangle + (+1)^\kappa |\psi_{\kappa(1)}\rangle |\psi_{\kappa(2)}\rangle \right] \quad (1.1.6)$$

η οποία μέσω της σχέσης (1.1.6) τελικά παίρνει τη γνωστή μορφή:

$$|\psi_1, \psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} [|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle] \quad (1.1.7)$$

Παρατηρούμε ότι η φυσική κατάσταση που περιγράφει το σύστημα μας είναι συμμετρική στην εναλλαγή των σωματιδίων, όπως ακριβώς περιμέναμε να συμβαίνει για τα μποζόνια.

Βάση αριθμών κατάληψης: Πρίν περάσουμε στη παρουσίαση του χώρου Fock είναι χρήσιμο να πούμε μερικά λόγια για τη βάση των αριθμών κατάληψης.

Έστω το σύνολο των καταστάσεων $\{u_1, u_2, \dots\}$ οι οποίες αποτελούν βάση στο χώρο καταστάσεων ενός σωματιδίου, δηλαδή ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad , \quad \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1 \quad (1.1.8)$$

Τότε οι καταστάσεις $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ του χώρου αυτού γράφονται σαν γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων βάσης δηλαδή

$$|\psi_1\rangle = \sum_{j_1} c_{1,j_1} |u_{j_1}\rangle \quad , \dots, \quad |\psi_n\rangle = \sum_{j_n} c_{n,j_n} |u_{j_n}\rangle \quad (1.1.9)$$

Η κατάσταση n σωματιδίων μέσω της σχέσης (1.1.1) και με τη βοήθεια της (1.1.11) παίρνει τη μορφή

$$|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{j_1, \dots, j_n} c_{1,j_1} \dots c_{n,j_n} \sum_P \zeta^P |u_{j_{P(1)}}\rangle \dots |u_{j_{P(n)}}\rangle \quad (1.1.10)$$

ή ακόμα καλύτερα

$$|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_n} c_{1,j_1} \dots c_{n,j_n} |u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle \quad (1.1.11)$$

όπου

$$|u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_P \zeta^P |u_{j_{P(1)}}\rangle \dots |u_{j_{P(n)}}\rangle \quad (1.1.12)$$

Παρατηρούμε ότι η σχέση (1.1.13) δεν είναι τίποτα άλλο παρά γενίκευση της σχέσης (1.1.11) στο χώρο καταστάσεων n μη διακρίσιμων σωματιδίων. Ουσιαστικά αποδείξαμε δηλαδή ότι κάθε κατάσταση $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων $|u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle$ και συνεπώς ότι οι καταστάσεις $|u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle$ αποτελούν βάση στο χώρο μας. Τα κανονικοποιημένα διανύσματα που αποτελούν βάση είναι τα

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{|u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \quad , \quad j_1 \leq \dots \leq j_n \quad (1.1.13)$$

στη περίπτωση των μποζονίων και

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = |u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle \quad , \quad j_1 < \dots < j_n \quad (1.1.14)$$

στη περίπτωση των φερμιονίων, όπως εύκολα μπορούμε να δείξουμε χρησιμοποιώντας τη σχέση (1.1.2).

Οι μη αρνητικοί αριθμοί n_j ονομάζονται αριθμοί κατάληψης των διαφόρων μονοσωματιδιακών καταστάσεων $|u_j\rangle$, φανερώνουν τον αριθμό των σωματιδίων που βρίσκονται στη κατάσταση $|u_j\rangle$ και ικανοποιούν τη σχέση

$$\sum_j n_j = n \quad (1.1.15)$$

ενώ η βάση που προέκυψε μέσα από τις σχέσεις (1.1.15)-(1.1.16) λέγεται βάση των αριθμών κατάληψης για την οποία ισχύουν οι σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\sum_{n_j, n_k, \dots} |n_j, n_k, \dots\rangle \langle n_j, n_k, \dots| = 1 \quad , \quad \langle n_j, n_k, \dots | n_l, n_m, \dots\rangle = \delta_{n_j, n_l} \delta_{n_k, n_m} \dots \quad (1.1.16)$$

Τέλος μια ακόμα χρήσιμη σχέση πληρότητας είναι

$$\frac{1}{n!} \sum_{j_1, \dots, j_n} |u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle \langle u_{j_1}, \dots, u_{j_n}| = 1 \quad (1.1.17)$$

(η οποία αποδεικνύεται αν δράσουμε με το αριστερο μέλος της (1.1.19) στη κατάσταση $|u_{i_1}, \dots, u_{i_n}\rangle$ και χρησιμοποιήσουμε την (1.1.2), όπου τα j_1, \dots, j_n παίρνουν τις τιμές 0, 1, 2, ... στη περίπτωση των μποζονίων.

1.2 Χώρος Fock

Μέχρι τώρα ασχοληθήκαμε με το χώρο καταστάσεων στον οποίο τα σωματίδια είχαν καθορισμένο αριθμό. Σε πολλές περιπτώσεις όμως μελετάμε συστήματα στα οποία ο αριθμός των σωματιδίων αλλάζει, άρα χρειαζόμαστε και τον αντίστοιχο χώρο καταστάσεων οι οποίες περιέχουν διαφορετικό αριθμό σωματιδίων. Ο χώρος αυτός ονομάζεται χώρος Fock και κατασκευάζεται από τον συνδυασμό των χώρων καταστάσεων n σωματιδίων όπου $n = 0, 1, 2, \dots$ Έστω $|\Psi\rangle$ μια γενική κατάσταση του χώρου Fock η οποία ορίζεται ως

$$|\Psi\rangle = |\Psi^{(0)}\rangle + |\Psi^{(1)}\rangle + |\Psi^{(2)}\rangle + \dots \quad (1.2.1)$$

όπου $|\Psi^{(n)}\rangle$ είναι μια κατάσταση n σωματιδίων με σχέση ορθογωνιότητας

$$\langle \Psi^{(m)} | \Psi^{(n)} \rangle = \delta_{m,n} \quad (1.2.2)$$

Όπως και στο χώρο n σωματιδίων, έτσι και στο χώρο Fock τα διανύσματα βάσης δεν είναι άλλα από αυτά των σχέσεων (1.1.15) - (1.1.16) με τη μόνη διαφορά τώρα ότι έχουμε το περιορισμό

$$\sum_j n_j < \infty \quad (1.2.3)$$

διότι πλέον ο αριθμός σωματιδίων δεν είναι σταθερός.

Η σχέση πληρότητας (1.1.19) θα αλλάξει και αυτή και θα γίνει

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} |u_{j_1}, u_{j_2}, \dots, u_{j_n}\rangle \langle u_{j_1}, u_{j_2}, \dots, u_{j_n}| = 1 \quad (1.2.4)$$

Σύνολο καταστάσεων $\{|\vec{x}, \sigma\rangle\}$: Παρόλο που η ανάλυση μας είναι σε θεωρητικό επίπεδο, είναι χρήσιμο στο σημείο αυτό να δούμε ένα παράδειγμα. Ας επιλέξουμε ως βάση του χώρου καταστάσεων ενός σωματιδίου το σύνολο των καταστάσεων $\{|\vec{x}, \sigma\rangle\}$ οι οποίες είναι ιδιοκαταστάσεις των τελεστών θέσης και σπίν. Προφανώς για τις καταστάσεις αυτές ισχύουν οι γνωστές σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\sum_{\sigma} \int d\vec{x} |\vec{x}, \sigma\rangle \langle \vec{x}, \sigma| = 1 \quad , \quad \langle \vec{x}, \sigma | \vec{x}', \sigma' \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (1.2.5)$$

Το διάνυσμα $|\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n\rangle$ περιγράφει τώρα τη κατάσταση n σωματιδίων στην οποία κάθε σωματίο i καταλαμβάνει την αντίστοιχη θέση \vec{x}_i με σπίν σ_i .

Στη βάση αυτή η σχέση (1.2.4) θα μετατραπεί ως εξής:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n |\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n\rangle \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n| = 1 \quad (1.2.6)$$

Έχοντας αυτά υπόψιν, μπορούμε να κατασκευάσουμε μια γενική κατάσταση του χώρου πολλών σωματιδίων. Έστω $|\Psi\rangle$ η κατάσταση αυτή. Τότε μπορεί να γραφεί με τη βοήθεια της (1.2.6) ως ανάπτυγμα της μορφής:

$$|\Psi\rangle = 1 * |\Psi\rangle \quad (1.2.7)$$

ή

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n |\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n\rangle \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi\rangle \quad (1.2.8)$$

Αν ορίσουμε

$$\Psi^{(n)}(\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi\rangle \quad (1.2.9)$$

τότε η (1.2.8) θα πάρει την χρήσιμη μορφή

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_n \Psi^{(n)}(\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n) |\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n\rangle \quad (1.2.10)$$

Στην ειδική περίπτωση που η $|\Psi\rangle$ είναι κατάσταση n σωματιδίων τότε η $\Psi^{(n)}(\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n)$, έτσι όπως έχει οριστεί, δεν είναι τίποτε άλλο παρά η σύνηθης κυματοσυνάρτηση, φανερώνει δηλαδή το πλάτος πιθανότητας να βρεθεί το i σωματίο στη θέση \vec{x}_i με σπίν σ_i .

Ετσι αν $|\Psi\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l\rangle$, όπου κάθε $|\psi_i\rangle$ είναι κατάσταση ενός σωματίου, η $\Psi^{(n)}$ ισούται με:

$$\Psi^{(n)}(\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_l, \sigma_l) = 0 \quad , \quad l \neq n \quad (1.2.11)$$

$$\Psi^{(n)}(\vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_l, \sigma_l) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left| \begin{array}{ccc} \langle \vec{x}_1 | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \vec{x}_1 | \psi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \vec{x}_n | \psi_1 \rangle & \dots & \langle \vec{x}_n | \psi_n \rangle \end{array} \right|_{\zeta} \quad (1.2.12)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση (1.2.4). Στη περίπτωση που $\zeta = -1$ η παραπάνω ορίζουσα είναι η γνωστή ορίζουσα Slater που δίνει την πλήρως αντισυμμετρική κυματοσυνάρτηση n μη διακρίσιμων φερμιονίων.

1.3 Τελεστές Καταστροφής και Δημιουργίας

Όπως είπαμε και στη προηγούμενη παράγραφο χρειαστήκαμε το χώρο καταστάσεων πολλών σωματιδίων, το χώρο Fock δηλαδή, διότι υπάρχουν διεργασίες στη φύση στις οποίες ο αριθμός των σωματιδίων αλλάζει. Για να μπορέσουμε λοιπόν να περιγράψουμε τις διεργασίες αυτές ορίζουμε στο χώρο αυτό τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων. Η σπουδαιότητα των τελεστών αυτών θα φανεί και από το γεγονός ότι οι άλλοι τελεστές, όπως η χαμιλτονιανή και ο αριθμός σωματιδίων, γράφονται συναρτήσει των τελεστών αυτών.

Έστω $|\varphi\rangle$ κατάσταση ενός σωματιδίου. Τότε ο τελεστής δημιουργίας ενός σωματιδίου στη κατάσταση αυτή θα ορίζεται από τη σχέση

$$\hat{a}^\dagger(\varphi) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = |\varphi, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.1)$$

Οι καταστάσεις $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ και $|\varphi, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ είναι καταστάσεις της μορφής (1.1.1) οπότε αμέσως γίνεται αντιληπτή η φυσική σημασία του τελεστή. Η δράση του τελεστή δημιουργίας σε μία κατάσταση n σωματιδίων είναι τέτοια που τη μετατρέπει σε κατάσταση $n + 1$ σωματιδίων.

Ο τελεστής καταστροφής ενός σωματιδίου δεν είναι τίποτε άλλο παρά ο συζυγής του αντίστοιχου τελεστή δημιουργίας, ορίζεται δηλαδή απο τη σχέση

$$\hat{a}(\varphi) = [\hat{a}^\dagger(\varphi)]^\dagger \quad (1.3.2)$$

Όπως είναι φυσικό, η δράση του τελεστή καταστροφής μετατρέπει μια κατάσταση n σωματιδίων σε κατάσταση $n - 1$ σωματιδίων. Συγκεκριμένα η δράση του δίνεται απο την εξίσωση [3]

$$\hat{a}(\varphi) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \sum_{k=1}^n \zeta^{k-1} \langle \varphi | \psi_k \rangle |\psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.3)$$

Ως κατάσταση κενού ορίζουμε τη κατάσταση $|0\rangle$ για την οποία ισχύουν οι σχέσεις

$$\hat{a}(\varphi) |0\rangle = 0 \quad (1.3.4)$$

$$\hat{a}^\dagger(\varphi) |0\rangle = |\varphi\rangle \quad (1.3.5)$$

με $\langle 0 | 0 \rangle = 1$

Έχοντας πλέον στην διάθεση μας τον τρόπο με τον οποίο δρουν οι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας μπορούμε να προσδιορίσουμε τις ιδιότητες τους δηλαδή τις μεταθετικές τους σχέσεις. Έστω $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ κατάσταση n σωματιδίων, τότε η διαδοχική δράση των τελεστών $\hat{a}^\dagger(\varphi_1)$ και $\hat{a}^\dagger(\varphi_2)$ θα δώσει

$$\hat{a}^\dagger(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = |\varphi_1, \varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.6)$$

Όμως

$$|\varphi_1, \varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \zeta |\varphi_2, \varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.7)$$

ανάλογα με το είδος των σωματιδίων. Συνεπώς θα ισχύει

$$\hat{a}^\dagger(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \zeta |\varphi_2, \varphi_1, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \zeta \hat{a}^\dagger(\varphi_2)\hat{a}^\dagger(\varphi_1) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.8)$$

Η τελευταία σχέση ισχύει για κάθε τύχαια κατάσταση $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ οπότε

$$\hat{a}^\dagger(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2) = \zeta \hat{a}^\dagger(\varphi_2)\hat{a}^\dagger(\varphi_1) \quad (1.3.9)$$

Εξάγαμε λοιπόν τη πρώτη μεταθετική σχέση των τελεστών η οποία εντελώς γενικά γράφεται ως:

$$[\hat{a}^\dagger(\varphi_1), \hat{a}^\dagger(\varphi_2)]_{-\zeta} = 0 \quad (1.3.10)$$

όπου εζ' ορισμού

$$[\hat{A}, \hat{B}]_{-\zeta} = \hat{A}\hat{B} - \zeta\hat{B}\hat{A} \quad (1.3.11)$$

Προφανώς παίρνοντας τη συζυγή παράσταση της (1.3.10) θα πάρουμε τη δεύτερη μεταθετική σχέση

$$[\hat{a}(\varphi_1), \hat{a}(\varphi_2)]_{-\zeta} = 0 \quad (1.3.12)$$

Η μόνη σχέση που μένει να υπολογίσουμε για να είναι πλήρης η εικόνα είναι ο μεταθέτης $[\hat{a}(\varphi_1), \hat{a}^\dagger(\varphi_2)]_{-\zeta}$. Έστω πάλι η κατάσταση n σωματιδίων $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$. Θα βρούμε τη δράση του τελεστή $\hat{a}(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2)$. Συγκεκριμένα θα έχουμε:

$$\hat{a}(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \hat{a}(\varphi_1) |\varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.13)$$

$$= \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle + \sum_{k=1}^n \zeta^k \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.14)$$

μέσω των σχέσεων (1.3.1)-(1.3.3).

Αν δράσουν οι τελεστές με διαφορετική σειρά θα ισχύει:

$$\zeta \hat{a}^\dagger(\varphi_2)\hat{a}(\varphi_1) |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \zeta \hat{a}^\dagger(\varphi_2) \sum_{k=1}^n \zeta^{k-1} \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.15)$$

$$= \sum_{k=1}^n \zeta^k \langle \varphi_1 | \psi_k \rangle |\varphi_2, \psi_1, \dots, \psi_{k-1}, \psi_{k+1}, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.16)$$

Αφαιρώντας τις σχέσεις (1.3.14),(1.3.16) κατά μέλη θα πάρουμε

$$[\hat{a}(\varphi_1)\hat{a}^\dagger(\varphi_2) - \zeta\hat{a}^\dagger(\varphi_2)\hat{a}(\varphi_1)] |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle |\psi_1, \dots, \psi_n\rangle \quad (1.3.17)$$

η οποία επειδή ισχύει για κάθε κατάσταση $|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle$ θα μας δώσει την ακόλουθη μεταθετική σχέση

$$[\hat{a}(\varphi_1), \hat{a}^\dagger(\varphi_2)]_{-\zeta} = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle \quad (1.3.18)$$

Οι σχέσεις (1.3.10),(1.3.12) και (1.3.18) αποτελούν τις θεμελιώδεις μεταθετικές σχέσεις που προσδιορίζουν πλήρως τους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας. Για να κατασκευά-

σοιμε συνεπώς τις καταστάσεις του χώρου Fock αρχικά δρούμε στη κατάσταση κενού $|0\rangle$ με τους τελεστές δημιουργίας κατασκευάζοντας έτσι τη κατάσταση n σωματιδίων

$$|\psi_1, \dots, \psi_n\rangle = \hat{a}^\dagger(\psi_1)\dots\hat{a}^\dagger(\psi_n)|0\rangle \quad (1.3.19)$$

και στη συνέχεια παίρνοντας τους γραμμικούς συνδυασμούς των καταστάσεων αυτών δημιουργούμε τη κατάσταση πολλών σωματιδίων.

1.3.1 Βάση Αριθμών Κατάληψης

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε τη τυχαία βάση του χώρου καταστάσεων ενός σωματιδίου $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots\}$. Οι σχέσεις μετάθεσης (1.3.10), (1.3.12) και (1.3.18) των αντίστοιχων τελεστών καταστροφής και δημιουργίας θα γίνουν:

$$\left[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\right]_{-\zeta} = [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_{-\zeta} = 0 \quad , \quad \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right]_{-\zeta} = \delta_{ij} \quad (1.3.20)$$

όπου $\hat{a}_i^\dagger = \hat{a}^\dagger(u_i)$ και $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$

Στο χώρο καταστάσεων n σωματιδίων είδαμε ότι μια βάση που είναι αρκετά χρήσιμη είναι η βάση των αριθμών κατάληψης. Έχοντας πλέον τους τελεστές σαν εργαλεία μπορούμε να εξάγουμε μερικά χρήσιμα συμπεράσματα. Ας επικεντρωθούμε στη περίπτωση των μποζονίων. Για $\zeta = +1$ οι σχέσεις μετάθεσης απλοποιούνται και έχουμε το γνωστό μεταθέτη.

Δηλαδή η (1.3.20) θα γίνει:

$$\left[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\right] = [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad , \quad \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right] = \delta_{ij} \quad (1.3.21)$$

Στη περίπτωση των μποζονίων τα διανύσματα βάσης βρήκαμε να είναι αυτά της σχέσης (1.1.15). Μπορούμε όμως τη κατάσταση $|u_{j_1}, \dots, u_{j_n}\rangle$ να τη γράψουμε συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας ως εξής:

$$|u_{j_1}, u_{j_2}, \dots, u_{j_n}\rangle = \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots \left(\hat{a}_n^\dagger\right)^{n_n} |0\rangle \quad (1.3.22)$$

όπου $n_j = 0, 1, 2$ ο αριθμός των μποζονίων στη κατάσταση $|u_j\rangle$. Άρα πλέον η βάση των αριθμών κατάληψης μπορεί να γραφεί ως:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{\left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \dots}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} |0\rangle \quad (1.3.23)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.3.21),(1.3.23) καθώς και τις $\hat{a}_i |0\rangle = 0$, $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ για κάθε i μπορούμε εύκολα να δείξουμε τις σχέσεις:

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (1.3.24)$$

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (1.3.25)$$

καθώς και

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (1.3.26)$$

Από τη τελευταία σχέση παρατηρούμε ότι η κατάσταση $|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle$ είναι ιδιοκατάσταση του τελεστή $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ με ιδιοτιμή τον αριθμό σωματιδίων στη κατάσταση αυτή. Άρα είναι λογικό να ονομάσουμε ως τελεστή του αριθμού σωματιδίων τον ερμιτιανό τελεστή

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (1.3.27)$$

η ιδιοτιμή του οποίου δίνει τον ολικό αριθμό σωματιδίων.

1.3.2 Τελεστές Πεδίου

Αν η βάση του χώρου καταστάσεων ενός σωματιδίου δεν είναι άλλη παρά το σύνολο των εντοπισμένων καταστάσεων $\{|\vec{x}, \sigma\rangle\}$ εφοδιασμένο με τις ιδιότητες που συνοψίζονται στις σχέσεις (1.2.5) οι αντίστοιχοι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας της βάσης αυτής είναι οι $\hat{a}(\vec{x}, \sigma)$ και $\hat{a}^\dagger(\vec{x}, \sigma)$. Τους τελεστές αυτούς τους ονομάζουμε τελεστές πεδίου, διότι εξαρτώνται μόνο από τη συντεταγμένες θέσης και από το σπιν και τους συμβολίζουμε με ένα ξεχωριστό τρόπο. Συγκεκριμένα ισχύει [3]:

$$\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}) \equiv \hat{a}(\vec{x}, \sigma) \quad , \quad \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}) \equiv \hat{a}^\dagger(\vec{x}, \sigma) \quad (1.3.28)$$

οι οποίοι προφανώς υπακούουν τις γενικές σχέσεις μετάθεσης

$$\left[\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}') \right]_{-\zeta} = \left[\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{x}') \right]_{-\zeta} = 0 \quad , \quad \left[\hat{\psi}_\sigma(\vec{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{x}') \right]_{-\zeta} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (1.3.29)$$

Συνήθως σε πολλά φυσικά προβλήματα δουλεύουμε με παραπάνω από μία βάσεις και άρα χρειάζεται να γνωρίζουμε έναν μετασχηματισμό μέσω του οποίου να μεταβαίνουμε από τη μία βάση στην άλλη. Έστω λοιπόν μια άλλη τυχαία βάση του χώρου καταστάσεων ενός σωματιδίου η οποία περιγράφεται από το σύνολο των διανυσμάτων $\{|\alpha\rangle\}$ εφοδιασμένα με

σχέσεις ορθοκανονικότητας

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad , \quad \langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.3.30)$$

Οι αντίστοιχοι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι οι $\hat{a}^{\dagger}(\alpha) = \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}$ και $\hat{a}(\alpha) = \hat{a}_{\alpha}$ οι οποίοι υπακούουν τις σχέσεις

$$[\hat{a}_{\alpha}, \hat{a}_{\beta}]_{-\zeta} = [\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}, \hat{a}_{\beta}^{\dagger}]_{-\zeta} = 0 \quad , \quad [\hat{a}_{\alpha}, \hat{a}_{\beta}^{\dagger}]_{-\zeta} = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.3.31)$$

Το ερώτημα είναι ποιά είναι η σχέση που συνδέει τους τελεστές $\hat{a}_{\alpha}^{\dagger}$ και $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x})$ καθώς και τους συζυγείς τους. Για τους τελεστές δημιουργίας ισχύει:

$$\begin{aligned} |\vec{x}, \sigma\rangle &= 1 * |\vec{x}, \sigma\rangle \\ &= \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | \vec{x}, \sigma\rangle \end{aligned}$$

και τελικά

$$|\vec{x}, \sigma\rangle = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle u_{\alpha}^*(\vec{x}, \sigma) \quad (1.3.32)$$

όπου $u_{\alpha}(\vec{x}, \sigma) = \langle \vec{x}, \sigma | \alpha \rangle$.

Όμως $|\vec{x}, \sigma\rangle = \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) |0\rangle$ και $|\alpha\rangle = \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle$, άρα η (1.3.32) γίνεται

$$\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) |0\rangle = \sum_{\alpha} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} |0\rangle u_{\alpha}^*(\vec{x}, \sigma)$$

η οποία τελικά δίνει:

$$\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha}^*(\vec{x}, \sigma) \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \quad (1.3.33)$$

Με ακριβώς όμοιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε την αντίστροφη σχέση, ότι δηλαδή

$$\hat{a}_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} u_{\alpha}(\vec{x}, \sigma) \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \quad (1.3.34)$$

Προφανώς για τις σχέσεις των τελεστών καταστροφής παίρνουμε τις συζυγείς παραστάσεις των σχέσεων (1.3.33), (1.3.34) και θα βρούμε :

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\vec{x}, \sigma) \hat{a}_{\alpha} \quad (1.3.35)$$

και

$$\hat{a}_{\alpha} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} u_{\alpha}^*(\vec{x}, \sigma) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.3.36)$$

1.4 Χρήσιμοι Τελεστές

Έχοντας πλέον ορίσει τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των σωματιδίων, κατασκευάζουμε τώρα τους τελεστές που παίζουν σημαντικό ρόλο στη περιγραφή της θεωρίας μας. Συγκεκριμένα ξεκινάμε από τους γενικευμένους τελεστές ενός σώματος, με τη βοήθεια των οποίων κατασκευάζουμε τη χαμιλτονιανή της ελεύθερης θεωρίας και το τελεστή του αριθμού σωματιδίων και συνεχίζουμε με τους γενικευμένους τελεστές δύο σωμάτων, με τη βοήθεια των οποίων κατασκευάσουμε τη χαμιλτονιανή της αλληλεπιδρώσας θεωρίας.

1.4.1 Τελεστές ενός σώματος

Έστω ότι έχουμε το τελεστή \hat{T} του οποίου η δράση στο χώρο καταστάσεων ενός σωματιδίου προσδιορίζεται από τη σχέση:

$$\langle \vec{x}\sigma | \hat{T} | \Psi^{(1)} \rangle = \sum_{\sigma'} T_{\sigma\sigma'}^{(1)}(\vec{x}, -i\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \langle \vec{x}, \sigma' | \Psi^{(1)} \rangle \quad (1.4.1)$$

όπου με $\Psi^{(1)}$ συμβολίζουμε τη κατάσταση ενός σωματιδίου.

Στόχος μας είναι να υπολογίσουμε αυτό το τελεστή με τέτοιο τρόπο ώστε η δράση του σε μια κατάσταση του χώρου Fock να ισούται με το άθροισμα των δράσεων του πάνω σε όλα τα σωματίδια. Δηλαδή αναζητούμε το τελεστή \hat{T} για τον οποίο ισχύει:

$$\langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \hat{T} | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^n \sum_{\sigma'} T_{\sigma_k\sigma'}^{(1)}(\vec{x}_k, -i\vec{\nabla}_{\vec{x}_k}) \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_k, \sigma'; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi \rangle \quad (1.4.2)$$

όπου $|\Psi\rangle$ τυχαία κατάσταση του χώρου Fock. Όλοι οι τελεστές των οποίων η δράση σε καταστάσεις πολλών σωματιδίων εκφράζεται από τη σχέση (1.4.2) ονομάζονται τελεστές ενός σώματος. Μπορούμε να αποδείξουμε ότι ο ζητούμενος τελεστής \hat{T} δίνεται από τη σχέση[3]:

$$\hat{T} = \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) T_{\sigma\sigma'}^{(1)}(\vec{x}, -i\vec{\nabla}_{\vec{x}}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}) \quad (1.4.3)$$

Η απόδειξη γίνεται με απευθείας εισαγωγή του τελεστή της (1.4.3) στο αριστερό μέλος της σχέσης (1.4.2) όπου με κατάλληλες πράξεις και χρησιμοποιώντας τις (1.3.1), (1.3.3) καταλήγουμε στο δεξί της μέλος.

Τελεστής χαμιλτονιανής πολλών σωματιδίων: Έστω ότι ο τελεστής \hat{T}' παρουσιάζει τη χαμιλτονιανή ενός σωματιδίου παρουσία εξωτερικού πεδίου $U(\vec{x})$, θα ισούται δηλαδή με

$$\hat{T}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{x}) \quad (1.4.4)$$

Τότε τα στοιχεία πίνακα της σχέσης (1.4.1) είναι ίσα με

$$\langle \vec{x}, \sigma | \hat{T}' | \Psi^{(1)} \rangle = \langle \vec{x}, \sigma | \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{x}) | \Psi^{(1)} \rangle \quad (1.4.5)$$

$$= \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \langle \vec{x}, \sigma | \Psi^{(1)} \rangle \quad (1.4.6)$$

ή ακόμα καλύτερα

$$\langle \vec{x}, \sigma | \hat{T}' | \Psi^{(1)} \rangle = \sum_{\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'} \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \langle \vec{x}, \sigma' | \Psi^{(1)} \rangle \quad (1.4.7)$$

Εξισώνοντας τις (1.4.1) με (1.4.7) έχουμε

$$\hat{T}_{\sigma\sigma'}^{(1)}(\vec{x}, -i\nabla_{\vec{x}}) = \delta_{\sigma\sigma'} \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \quad (1.4.8)$$

Συνεπώς ο τελεστής που προσδιορίζεται απο τη (1.4.3) και περιγράφει τη χαμιλτονιανή ενός συστήματος σωματιδίων παρουσία εξωτερικού πεδίου είναι

$$\hat{H} = \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \delta_{\sigma\sigma'} \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}) \quad (1.4.9)$$

ή

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.4.10)$$

Τελεστής ορμής πολλών σωματιδίων: Έστω ότι στη περίπτωση αυτή ο τελεστής παριστάνει την ορμή ενός σωματιδίου, τότε σε αναλογία με τη (1.4.7) θα ισχύει

$$\langle \vec{x}\sigma | \hat{T}' | \Psi^{(1)} \rangle = \sum_{\sigma'} \delta_{\sigma\sigma'} \left[-i\vec{\nabla}_x \right] \langle \vec{x}\sigma' | \Psi^{(1)} \rangle \quad (1.4.11)$$

και άρα

$$\hat{T}_{\sigma\sigma'}^{(1)}(\vec{x}, -i\nabla_{\vec{x}}) = \delta_{\sigma\sigma'} \left[-i\vec{\nabla}_x \right] \quad (1.4.12)$$

Επομένως η ορμή του συστήματος των σωματιδίων με βάση τη σχέση (1.4.3) θα είναι:

$$\hat{P} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \left[-i\vec{\nabla}_x \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.4.13)$$

Τελεστής αριθμού σωματιδίων: Ας υποθέσουμε ότι έχουμε το τελεστή $\hat{T}_{\sigma\sigma'}^{(1)}(\vec{x}, -i\nabla_{\vec{x}}) = \delta_{\sigma\sigma'} * 1$ και έστω ότι συμβολίζουμε $\hat{T} = \hat{N}$ το τελεστή που ικανοποιεί την

(1.4.2). Τότε με την απευθείας αντικατάσταση του στη (1.4.2) θα πάρουμε

$$\langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \hat{N} | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^N \sum_{\sigma'} \delta_{\sigma_k \sigma'} \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_k, \sigma'; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi \rangle \quad (1.4.14)$$

$$= \sum_{k=1}^N \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_k, \sigma_k; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi \rangle \quad (1.4.15)$$

δηλαδή θα πάρουμε

$$\langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \hat{N} | \Psi \rangle = n \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \Psi \rangle \quad (1.4.16)$$

Απο τη τελευταία σχέση αντιλαμβανόμαστε ότι ο τελεστής $\hat{T} = \hat{N}$ αντιστοιχεί στον τελεστή του ολικού αριθμού σωματιδίων. Άρα έχουμε από την εξίσωση (1.4.3) ότι:

$$\hat{N} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.4.17)$$

Στα φυσικά συστήματα που μελετάμε υπάρχουν όμως και αλληλεπιδράσεις τις οποίες τις περιγράφουμε με κάποιον επιπλέον όρο στη χαμιλτονιανή μας. Για να μπορέσουμε να τις περιγράψουμε πρέπει να αναφερθούμε αρχικά στους τελεστές δύο σωμάτων τους οποίους και υπολογίζουμε.

1.4.2 Τελεστές δύο σωμάτων

Όπως και στη περίπτωση των τελεστών ενός σώματος, ας υποθέσουμε ότι έχουμε το τελεστή \hat{H}_{int} του οποίου η δράση στο χώρο καταστάσεων δύο σωματιδίων είναι γνωστή και ισούται με:

$$\langle \vec{x}_1, \sigma_1; \vec{x}_2, \sigma_2 | \hat{H}_{\text{int}} | \hat{\Psi}^{(2)} \rangle = v(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \vec{x}_2, \sigma_2 | \hat{\Psi}^{(2)} \rangle \quad (1.4.18)$$

όπου $|\hat{\Psi}^{(2)}\rangle$ τυχαία κατάσταση δύο σωματιδίων.

Στόχος μας είναι να υπολογίσουμε αυτό το τελεστή με τέτοιο τρόπο ώστε η δράση του πάνω σε μια κατάσταση πολλών σωματιδίων να ισούται με το άθροισμα του πάνω σε όλα τα ζεύγη των σωματιδίων. Να ισχύει δηλαδή:

$$\langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \hat{H}_{\text{int}} | \hat{\Psi} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \langle \vec{x}_1, \sigma_1; \dots; \vec{x}_n, \sigma_n | \hat{\Psi} \rangle \quad (1.4.19)$$

με $v(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = v(\vec{x}_j, \vec{x}_i)$ λόγω του ότι τα σωματίδια είναι ταυτόσημα. Δίχως να κάνουμε την απόδειξη η οποία είναι αρκετά μακροσκελής μπορεί να δειχθεί [3] ότι ο ζητούμενος τελεστής

είναι ίσος με:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}') v(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.4.20)$$

Αν η συνάρτηση $v(\vec{x}, \vec{x}')$ παίρνει τιμές πραγματικές τότε καταλαβαίνουμε ότι μπορεί να παίζει άνετα το ρόλο της δυναμικής ενέργειας των σωματιδίων που αλληλεπιδρούν.

Τώρα που έχουμε πλέον στα χέρια μας τη μορφή όλων των σημαντικών τελεστών μπορούμε να γράψουμε την ολική χαμιλτονιανή αλληλεπιδρώντων σωματιδίων παρουσία εξωτερικού πεδίου:

$$\hat{H}_{\text{total}} = \hat{H} + \hat{H}_{\text{int}} \quad (1.4.21)$$

η οποία μέσω των (1.4.10) και (1.4.20) είναι:

$$\hat{H}_{\text{total}} = \sum_{\sigma} \int d\vec{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \left[\frac{-\nabla^2}{2m} + U(\vec{x}) \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\vec{x} \int d\vec{x}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{x}') v(\vec{x}, \vec{x}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{x}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{x}) \quad (1.4.22)$$

Η τελευταία σχέση είναι ιδιαίτερος σημαντική διότι αποτελέσει το εφαλτήριο για την εξαγωγή της περίφημης εξίσωσης Gross–Pitaevski την οποία χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε το συμπύκνωμα Bose–Einstein στα αραιά και ψυχρά αέρια αλκαλίων.

Κεφάλαιο 2

Γενική Διατύπωση Συμπυκνώματος

Πριν περάσουμε στο κεφάλαιο του κβαντικού ιδανικού αερίου μποζονίων, το οποίο αποτελεί και το απλούστερο μοντέλο ανάδειξης του φαινομένου της συμπύκνωσης Bose–Einstein, είναι χρήσιμο να καταλάβουμε τι είναι αυτή η αλλαγή φάσης που παρατηρείται σε ορισμένα αέρια κάτω από κατάλληλες συνθήκες και να την ορίσουμε. Σκοπός του παρόντος κεφαλαίου είναι να παρουσιάσουμε το συμπύκνωμα σε εντελώς γενικό επίπεδο καθώς και να έρθουμε για πρώτη φορά σε επαφή με την έννοια της παραμέτρου τάξης καθώς και με τη προσέγγιση Bogoliubov.

2.1 Πίνακας πυκνότητας ενός σώματος

Χώρος θέσεων: Για να μπορέσουμε να ξεκινήσουμε την ανάλυση μας ορίζουμε αρχικά το μέγεθος που καλείται πίνακας πυκνότητας ενός σώματος (one–body density matrix)[1]

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \rangle \quad (2.1.1)$$

όπου $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$, $\hat{\Psi}(\vec{r})$ οι πεδιακοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής μποζονίου στη θέση \vec{r} με τις γνωστές σχέσεις μετάθεσης (1.3.29). Η ποσότητα (2.1.1) έτσι όπως ορίστηκε παρουσιάζει εντελώς γενικό χαρακτήρα και μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιοδήποτε σύστημα σωματιδίων είτε αυτά είναι μποζόνια είτε φερμιόνια.

Η φυσική σημασία του πίνακα πυκνότητας γίνεται εμφανής αν θέσουμε $\vec{r} = \vec{r}'$ και πάρουμε έτσι τη διαγώνια μορφή του. Δηλαδή:

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \rangle = n(\vec{r}) \quad (2.1.2)$$

Ο ολικός αριθμός των σωματιδίων θα είναι τότε

$$N = \int d\vec{r} n(\vec{r}) \quad (2.1.3)$$

Παρατηρούμε δηλαδή ότι η διαγώνια μορφή του πίνακα δεν είναι τίποτα άλλο παρά η πυκνότητα των σωματιδίων.

Ο πίνακας πυκνότητας προφανώς ικανοποιεί και μια εξίσωση ιδιοτιμών—ιδιοκαταστάσεων, η οποία είναι

$$\int d\vec{r}' n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') = n_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.1.4)$$

με $\varphi_i(\vec{r})$ τις καταστάσεις ενός σωματιδίου οι οποίες αποτελούν και βάση του χώρου. Ικανοποιούν δηλαδή τις σχέσεις:

$$\sum_i \varphi_i(\vec{r}) \varphi_i^*(\vec{r}') \quad , \quad \int d\vec{r} \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}) = \delta_{ij} \quad (2.1.5)$$

Οι ιδιοτιμές n_i του τελεστή πυκνότητας έχουν μεγάλη φυσική σημασία. Για να την ανακαλύψουμε πολλαπλασιάζουμε και τα δύο μέλη της εξίσωσης (2.1.4) με $\sum_i \int d\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r})$ και παίρνουμε τη σχέση:

$$\int d\vec{r} d\vec{r}' n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') \sum_i \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') = \sum_i n_i \int d\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.1.6)$$

η οποία με χρήση των (2.1.5) γίνεται:

$$\int d\vec{r} d\vec{r}' n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_i n_i \quad (2.1.7)$$

Εκτελώντας την ολοκλήρωση μέσω της συνάρτησης δέλτα ως προς το \vec{r}' και κάνοντας χρήση της (2.1.3) τελικά έχουμε:

$$\int d\vec{r} n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}) = \sum_i n_i \quad (2.1.8)$$

$$N = \sum_i n_i \quad (2.1.9)$$

Από τη τελευταία εξίσωση συμπεραίνουμε ότι οι ιδιοτιμές του τελεστή πυκνότητας εκφράζουν τον αριθμό των σωματιδίων σε κάθε μονοσωματιδιακή κατάσταση.

Αν υποθέσουμε ότι ο πίνακας πυκνότητας είναι πίνακας με δείκτες τα r, r' τότε μπορούμε εύκολα από τη σχέση ορισμού του να παρατηρήσουμε ότι είναι και ερμιτιανός, ότι δηλαδή ισχύει $n^{(1)}(r, r') = (n^{(1)}(r', r))^*$. Η παρατήρηση αυτή είναι σημαντική διότι μας επιτρέπει να το διαγωνοποιήσουμε χρησιμοποιώντας την ήδη γνωστή βάση των καταστάσεων $\varphi_i(\vec{r})$.

Μπορούμε δηλαδή να τον εκφράσουμε σαν:

$$n^{(1)}(r, r') = \sum_i n_i \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') \quad (2.1.10)$$

Προφανώς η πυκνότητα των σωματιδίων θα είναι:

$$n(\vec{r}) = n^{(1)}(r, r) = \sum_i n_i |\varphi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.1.11)$$

Χώρος ορμών: Για να μεταβούμε στο χώρο των ορμών αρκεί να πάρουμε το μετασχηματισμό Fourier των πεδιακών τελεστών $\hat{\Psi}(\vec{r})$. Δηλαδή:

$$\hat{\Psi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\vec{r}' \hat{\Psi}(\vec{r}') e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}} \quad , \quad \hat{\Psi}^\dagger(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\vec{r} \hat{\Psi}(\vec{r}) e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \quad (2.1.12)$$

Αντικαθιστώντας τις σχέσεις αυτές στην (2.1.2) έχουμε για τη πυκνότητα των σωματιδίων στο χώρο των ορμών

$$\begin{aligned} n(\vec{p}) &= \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{p}) \hat{\Psi}(\vec{p}) \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{r} d\vec{r}' \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \rangle e^{i\frac{\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}} \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

Ορίζοντας τις νέες μεταβλητές $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$, $\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2}$ και παίρνοντας την ιακωβιανή του παραπάνω μετασχηματισμού βρίσκουμε:

$$n(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{R} d\vec{s} \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{R} + \vec{s}/2) \hat{\Psi}(\vec{R} - \vec{s}/2) \rangle e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{s}}{\hbar}} \quad (2.1.14)$$

η οποία τελικά ισούται με:

$$n(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{R} d\vec{s} n^{(1)}(\vec{R} + \vec{s}/2, \vec{R} - \vec{s}/2) e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{s}}{\hbar}} \quad (2.1.15)$$

Ομογενή συστήματα: Προκειμένου να ορίσουμε το συμπύκνωμα ας εξετάσουμε τη περίπτωση των ομογενών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ας θεωρήσουμε τη περίπτωση ομογενούς και ισότροπου συστήματος N μποζονίων στο θερμοδυναμικό όριο. Στη περίπτωση αυτή ο πίνακας πυκνότητας $n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}')$ εξαρτάται μόνο απο το μέτρο του διανύσματος $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$ και μπορεί να γραφεί μέσω Fourier σαν

$$n^{(1)}(s) = \frac{1}{V} \int d\vec{p} n(\vec{p}) e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{s}}{\hbar}} \quad (2.1.16)$$

Αν η πυκνότητα στο χώρο των ορμών $n(\vec{p})$ είναι ομαλή συνάρτηση τότε καθώς $s \rightarrow \infty$ θα έχουμε $n^{(1)}(s) \rightarrow 0$.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η περίπτωση στην οποία κάποια από τις μονοσωματιδιακές καταστάσεις είναι κατειλημμένη μακροσκοπικά. Δηλαδή ότι ο αριθμός των σωματιδίων—ατόμων στη κατάσταση αυτή είναι συγκρίσιμος με τον ολικό αριθμό. Έστω ότι η κατάσταση αυτή είναι η $i = 0$. Τότε αν στη (2.1.10) ξεχωρίσουμε τη συνεισφορά της κατάστασης αυτής από το άθροισμα θα έχουμε:

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = N_0 \varphi_0^*(\vec{r}) \varphi_0(\vec{r}') + \sum_{i \neq 0} n_i \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}') \quad (2.1.17)$$

με $N_0 = n_{i=0}$. Στο ομογενές σύστημα που μελετάμε οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις είναι τα επίπεδα κύματα $\varphi_{\vec{p}_i}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i \frac{\vec{p}_i \vec{r}}{\hbar}}$ και άρα κάθε κατάσταση χαρακτηρίζεται από την ορμή της \vec{p}_i .

Συνεπώς η (2.1.17) θα γίνει:

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{N_0}{V} + \sum_{\vec{p}_i \neq 0} n_{\vec{p}_i} \varphi_{\vec{p}_i}^*(\vec{r}) \varphi_{\vec{p}_i}(\vec{r}') \quad (2.1.18)$$

Η πυκνότητα της ορμής (2.1.15) μέσω της (2.1.18) θα γίνει:

$$n(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{R} d\vec{s} \left[\frac{N_0}{V} + \sum_{\vec{p}_i \neq 0} n_{\vec{p}_i} \varphi_{\vec{p}_i}^* \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2} \right) \varphi_{\vec{p}_i} \left(\vec{R} + \frac{\vec{s}}{2} \right) \right] e^{i \frac{\vec{p} \vec{s}}{\hbar}} \quad (2.1.19)$$

Κάνοντας τις πράξεις καταλήγουμε στη σχέση:

$$n(\vec{p}) = N_0 \delta(\vec{p}) + \sum_{\vec{p}_i \neq 0} n_{\vec{p}_i} \delta(\vec{p} - \vec{p}_i) \quad (2.1.20)$$

από όπου με την αντικατάσταση $\sum_{\vec{p}_i \neq 0} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p}$ εξάγουμε τη τελική σχέση για τη κατανομή της πυκνότητας

$$n(\vec{p}) = N_0 \delta(\vec{p}) + \tilde{n}(\vec{p}) \quad (2.1.21)$$

με $\tilde{n}(\vec{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} n_{\vec{p}}$. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η κατανομή της ορμής παρουσιάζει μια ανωμαλία η οποία προέρχεται από το γεγονός ότι η κατάσταση με $\vec{p} = 0$ είναι μακροσκοπικά κατειλημμένη. Η ανωμαλία αυτή εμφανίζεται και στο χώρο των θέσεων διότι τώρα για $s \rightarrow \infty$ και μέσω της (2.1.21) η (2.1.16) δεν τείνει στο μηδέν αλλά τείνει σε πεπερασμένη τιμή.

Συγκεκριμένα:

$$n^{(1)}(s) \rightarrow \frac{N_0}{V} = n_0 \quad (2.1.22)$$

όπου n_0 η πυκνότητα των ατόμων στο χώρο των θέσεων.

Συνοψίζοντας λοιπόν εξάγαμε τα εξής συμπεράσματα. Αν η πυκνότητα της ορμής των ατόμων είναι ομαλή συνάρτηση τότε και ο πίνακας πυκνότητας για $s \rightarrow \infty$ τείνει στο μηδέν. Αν όμως η κατανομή της ορμής εμφανίζει ανωμαλία η οποία οφείλεται στο ότι μια μονοσωματιδιακή κατάσταση είναι μακροσκοπικά κατειλημμένη τότε ο πίνακας πυκνότητας τείνει σε μια πεπερασμένη τιμή η οποία συμπίπτει με τη πυκνότητα των ατόμων στο χώρο των θέσεων. Αυτή ακριβώς η μακροσκοπική κατάληψη μιας μονοσωματιδιακής κατάστασης, η οποία συμβαίνει απο κάποια κρίσιμη θερμοκρασία και κάτω, ορίζει με εντελώς γενικό τρόπο το φαινόμενο της συμπύκνωσης Bose–Einstein. Η ποσότητα που είναι χρήσιμη για τη μελέτη του φαινομένου είναι το πηλίκο $\frac{N_0}{N}$ που καλείται λόγος συμπυκνώματος, η τιμή του οποίου εξαρτάται από τη θερμοκρασίας στην οποία βρίσκονται τα άτομα [1].

Στη περίπτωση μας τα συμπυκνωμένα άτομα βρίσκονται στη κατάσταση με $\vec{p} = 0$ και έχουν σταθερή πυκνότητα $n_0 = \frac{N_0}{V}$.

2.2 Παράμετρος Τάξης

Η διαγωνοποίηση του πίνακα πυκνότητας στη σχέση (2.1.10) μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε τις καταστάσεις ενός σωματιδίου $\varphi_i(\vec{r})$ για να αναπτύξουμε τους πεδιακούς τελεστές. Μπορούμε δηλαδή να γράψουμε:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sum_i \hat{a}_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.2.1)$$

με τη σκέψη ότι πλέον μιλάμε για μη ομογενή και με αλληλεπιδράσεις συστήματα και άρα οι καταστάσεις $\varphi_i(\vec{r})$ δεν είναι τα επίπεδα κύματα. Η αντικατάσταση της (2.2.1) στη (2.1.1) δίνει:

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \rangle = \sum_{i,j} \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}') \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \quad (2.2.2)$$

απ' όπου ξεχωρίζοντας τη συνεισφορά $i = j = 0$ παίρνουμε

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \varphi_0^*(\vec{r}) \varphi_0(\vec{r}') \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle + \sum_{i,j \neq 0} \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}') \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \quad (2.2.3)$$

Συγκρίνοντας τη (2.1.17) με τη (2.2.3) καταλήγουμε σε δύο πολύ σημαντικές σχέσεις

για τους αριθμούς των ατόμων στις διάφορες μονοσωματιδιακές καταστάσεις.

$$N_0 = \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle \quad , \quad \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \delta_{ij} n_{ij} \quad (2.2.4)$$

Η σχέση (2.2.1) μπορεί να γραφεί λίγο πιο αναλυτικά ως εξής:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \hat{a}_0 \varphi_0(\vec{r}) + \sum_{i \neq 0} \hat{a}_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.2.5)$$

Το φαινόμενο της συμπύκνωσης, όπως αναφέραμε νωρίτερα, εμφανίζεται όταν η κατάσταση με $i = 0$ είναι μακροσκοπικά κατειλημμένη δηλαδή όταν $N_0 \gg 1$. Συνεπώς, στη περίπτωση αυτή, οι καταστάσεις που περιγράφουν το σύστημα και έχουν αριθμό ατόμων $|N\rangle$, $|N + 1\rangle \propto \hat{a}_0^\dagger |N\rangle$ και $|N - 1\rangle \propto \hat{a}_0 |N\rangle$ είναι φυσικά ισοδύναμες παρόλο που περιέχουν διαφορετικό αριθμό ατόμων, οπότε οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων στη κατάσταση $i = 0$ μπορούν να θεωρηθούν ως αριθμοί με τιμή

$$\hat{a}_0^\dagger = \hat{a}_0 = \sqrt{N_0} \quad (2.2.6)$$

όπως προκύπτει από τη (2.2.4). Η προσέγγιση αυτή ονομάζεται προσέγγιση Bogoliubov και ουσιαστικά αποτελεί το εναρκτήριο σημείο για την θεωρία μέσου πεδίου η οποία αναπτύσσεται σε επόμενο κεφάλαιο.

Μέσω της παραπάνω προσέγγισης η (2.2.5) γράφεται

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \sqrt{N_0} \varphi_0(\vec{r}) + \sum_{i \neq 0} \hat{a}_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.2.7)$$

ή ακόμα καλύτερα ως:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \delta \hat{\Psi}(\vec{r}) \quad (2.2.8)$$

όπου $\Psi_0(\vec{r}) = \sqrt{N_0} \varphi_0(\vec{r})$.

Η συνάρτηση $\Psi_0(\vec{r})$ ονομάζεται κυματοσυνάρτηση του συμπυκνώματος, χαρακτηρίζει πλήρως το συμπύκνωμα κάτω από ορισμένες προϋποθέσεις (το αέριο να είναι αραιό και ψυχρό) και παίζει το ρόλο παραμέτρου τάξης του συμπυκνώματος. Λόγω του ότι είναι ένα κλασικό πεδίο μπορεί να γραφεί ως

$$\Psi_0(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})| e^{iS(\vec{r})} \quad (2.2.9)$$

όπου το μέτρο του πεδίου μας δίνει τη πυκνότητα των σωματιδίων του συμπυκνώματος δηλαδή $n_0(\vec{r}) = |\Psi_0(\vec{r})|^2$ και η φάση συνδέεται με φαινόμενα υπερρευστότητας και συνεκτικότητας.

Κεφάλαιο 3

Ιδανικό Αέριο Μποζονίων

Στο προηγούμενο κεφάλαιο παρουσιάσαμε το φαινόμενο της συμπύκνωσης σε εντελώς γενικό επίπεδο. Το πιο απλό φυσικό σύστημα το οποίο δέχεται αναλυτική λύση και στο οποίο εμφανίζεται το φαινόμενο με αρκετά απλό τρόπο είναι το ιδανικό αέριο μποζονίων. Παρόλο που δεν ανταποκρίνεται πλήρως στη πραγματικότητα τα συμπεράσματα που εξάγονται από τη μελέτη του είναι χρήσιμα ακόμα και για τα πραγματικά αέρια. Στο κεφάλαιο αυτό αρχικά παρουσιάζουμε το ιδανικό αέριο στα πλαίσια της μεγαλοκανονικής συλλογής όπου και δίνουμε τον ορισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας. Στη συνέχεια εφαρμόζουμε το φορμαλισμό αυτό για ιδανικό αέριο σε κουτί όγκου V και τέλος αναλύουμε το ιδανικό αέριο παρουσία εξωτερικού αρμονικού δυναμικού παγίδευσης.

3.1 Ιδανικό αέριο και μεγαλοκανονική συλλογή

Στη παράγραφο αυτή μελετάμε το ιδανικό αέριο στα πλαίσια της μεγαλοκανονικής συλλογής. Γνωρίζουμε από τη στατιστική μηχανική ότι οι μεταβλητές που περιγράφουν το σύστημα μας είναι οι $\{T, V, \mu\}$. Η πιθανότητα το αέριο να βρεθεί σε κατάσταση με ενέργεια E_k και αριθμό σωματιδίων N_k δίνεται από τη γνωστή σχέση

$$p_k = \frac{e^{-\beta(E_k - \mu N_k)}}{\Xi} \quad (3.1.1)$$

όπου με Ξ συμβολίζουμε τη μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού η οποία ισούται με

$$\Xi = \sum_k e^{-\beta(E_k - \mu N_k)} \quad (3.1.2)$$

Η άθροιση ισχύει πάνω σε όλες τις ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής οι οποίες αποτελούν ένα πλήρες σύστημα. Στη μεγαλοκανονική συλλογή εκτός από τις παραπάνω σχέσεις

ισχύουν και οι ακόλουθες. Συγκεκριμένα το μεγάλο δυναμικό Ω ισούται με

$$\Omega = -k_B T \ln \Xi \quad (3.1.3)$$

ενώ ο μέσος αριθμός σωματιδίων και η εντροπία προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad , \quad S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad (3.1.4)$$

Τέλος, αν το σύστημα είναι ομογενές και καταλαμβάνει όγκο V το μεγάλο δυναμικό θα υπακούει επιπλέον τη καταστατική εξίσωση

$$\Omega = -PV \quad (3.1.5)$$

Ας θεωρήσουμε ότι το σύστημα που μελετάμε αποτελείται από N άτομα τα οποία δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Τότε η ολική χαμιλτονιανή είναι ίση με το ευθύ άθροισμα των επιμέρους χαμιλτονιανών του καθενός σωματιδίου, δηλαδή

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i^{(1)} \quad (3.1.6)$$

όπου η κάθε χαμιλτονιανή υπακούει στην εξίσωση $\hat{H}_i^{(1)} \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i$. Ο ολικός αριθμός σωματιδίων στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης θα είναι

$$N = \sum_i n_i \quad (3.1.7)$$

με n_i τον αριθμό σωματιδίων σε κάθε μονοσωματιδιακή κατάσταση και η ολική ενέργεια του συστήματος ισούται με

$$E = \sum_i \varepsilon_i n_i \quad (3.1.8)$$

Συνεπώς η μεγάλη συνάρτηση επιμερισμού μέσω της (3.1.2) και των (3.1.7)-(3.1.8) ισούται με :

$$\Xi = \sum_k e^{\beta(\mu N_k - E_k)} = \sum_{\{n_i\}} e^{\beta(\mu \sum_i n_i - \sum_i \varepsilon_i n_i)} \quad (3.1.9)$$

η οποία εκτελώντας μερικές πράξεις προκύπτει να είναι:

$$\Xi = \sum_{n_0} e^{\beta(\mu - \varepsilon_0)n_0} \sum_{n_1} e^{\beta(\mu - \varepsilon_1)n_1} \dots \quad (3.1.10)$$

Άρα το μεγάλο δυναμικό μέσω της (3.1.3) είναι:

$$\Omega = -k_B T \ln \Xi = -k_B T \ln \left(\sum_{n_0} e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)n_0} \sum_{n_1} e^{\beta(\mu-\varepsilon_1)n_1} \dots \right) \quad (3.1.11)$$

ή

$$\Omega = -k_B T \left[\ln \left(\sum_{n_0} e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)n_0} \right) + \ln \left(\sum_{n_1} e^{\beta(\mu-\varepsilon_1)n_1} \right) \dots \right] \quad (3.1.12)$$

Μέσω της σχέσης $\sum_n x^n = \frac{1}{1-x}$ με $|x| < 1$ και των γνωστών λογαριθμικών ταυτοτήτων η (3.1.12) γίνεται

$$\Omega = -k_B T \left[-\ln (1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_0)n_0}) - \ln (1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_1)n_1}) \dots \right] \quad (3.1.13)$$

ή πιο συνοπτικά :

$$\Omega = k_B T \sum_i \ln (1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}) \quad (3.1.14)$$

Η σχέση (3.1.14) είναι σημαντική διότι μέσω του μεγάλου δυναμικού προκύπτουν όλες οι άλλες ποσότητες όπως ο αριθμός σωματιδίων και η ενέργεια. Έτσι από τη σχέση (3.1.4) ο ολικός αριθμός των σωματιδίων είναι

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \left[k_B T \sum_i \ln (1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}) \right] \quad (3.1.15)$$

Εκτελώντας τη παραγωγή έχουμε τη σχέση

$$N = \sum_i \frac{e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}}{1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}} \quad (3.1.16)$$

την οποία πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη με $e^{-\beta(\mu-\varepsilon_i)}$ εξάγουμε τη γνωστή σχέση για τον μέσο ολικό αριθμό σωματιδίων

$$N = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)} - 1} \quad (3.1.17)$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις (3.1.7) και (3.1.17) εύκολα καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι ο μέσος αριθμός κατάληψης της κάθε μονοσωματιδιακής κατάστασης είναι ίσος με:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)} - 1} \quad (3.1.18)$$

Γνωρίζοντας πλέον το \bar{n} μπορούμε να υπολογίσουμε και τις υπόλοιπες θερμοδυναμικές συναρτήσεις όπως την ενέργεια

$$E = \sum_i \frac{\bar{\varepsilon}_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (3.1.19)$$

αλλά και την εντροπία η οποία μέσω της (3.1.4) είναι ίση με:

$$\frac{S}{k_B} = -\frac{1}{k_B} \frac{\partial \Omega}{\partial T} = -\frac{\partial}{\partial T} \left[T \sum_i \ln(1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)}) \right] \quad (3.1.20)$$

ή μετά τη παραγωγή και μερικές πράξεις:

$$S = \sum_i \left[\frac{\beta(\varepsilon_i - \mu)}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} - \ln(1 - e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)}) \right] \quad (3.1.21)$$

Στο σημείο αυτό, πρίν μεταβούμε στη περίπτωση του ιδανικού αερίου σε κουτί όγκου V , πρέπει να κάνουμε μερικές παρατηρήσεις:

- Για λόγους προφανείς είναι αναγκαίο ο μέσος αριθμός κατάληψης μιας μονοσωματιδιακής κατάστασης να είναι θετικός. Δηλαδή να ισχύει

$$\bar{n}_i > 0 \quad (3.1.22)$$

Αυτό όμως σημαίνει ότι $\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} > 0$ ή ακόμα καλύτερα ότι:

$$\mu < \varepsilon_i \quad (3.1.23)$$

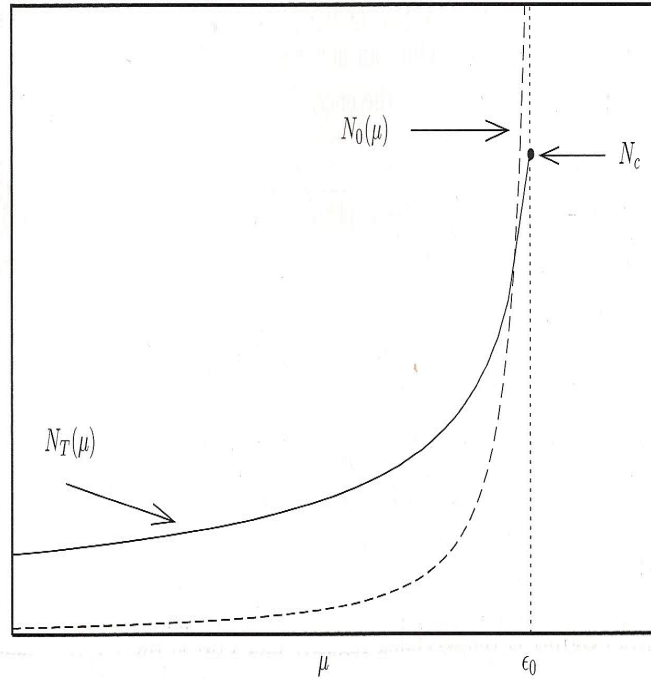
από κάθε i μονοσωματιδιακή κατάσταση, άρα και από την $i = 0$. Συνεπώς η απαίτηση που πρέπει να ικανοποιεί το χημικό δυναμικό είναι η εξής:

$$\mu < \varepsilon_0 \quad (3.1.24)$$

- Ο μέσος αριθμός κατάληψης της $i = 0$ μονοσωματιδιακής κατάστασης, δηλαδή ο αριθμός των σωματιδίων στη κατάσταση αυτή είναι

$$N_0 = \bar{n}_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} \quad (3.1.25)$$

Παρατηρούμε ότι καθώς καθώς $\mu \rightarrow \varepsilon_0$ ο αριθμός των σωματιδίων αυξάνει και γίνεται αρκετά μεγάλος σε σημείο που να γίνεται συγκρίσιμος με τον ολικό αριθμό N . Αυτός ουσιαστικά είναι ο μηχανισμός μέσω του οποίου αρχίζει να εμφανίζεται το συμπύκνωμα.



Σχήμα 3.1: Ο αριθμός των ατόμων εντός και εκτός του συμπυκνώματος σαν συνάρτηση του χημικού δυναμικού για καθορισμένη θερμοκρασία.

- Απο τη σχέση (3.1.7) αν απομονώσουμε το κομμάτι που αντιστοιχεί στην $i = 0$ κατάσταση προκύπτει η σχέση:

$$N = \bar{n}_0 + \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i \quad (3.1.26)$$

ή με πιο συνοπτικό τρόπο:

$$N(T, \mu) = N_0 + N_T(T, \mu) \quad (3.1.27)$$

με $N_T(T, \mu) = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i$ τη θερμική συνιστώσα του αερίου που εκφράζει τον αριθμό των σωματιδίων εκτός του συμπυκνώματος η οποία όπως παρατηρούμε εξαρτάται απο δύο μεταβλητές.

Η θερμική συνιστώσα του αερίου παρουσιάζει την εξής συμπεριφορά, όπως φαίνεται και από το σχήμα. Για καθορισμένη θερμοκρασία T αυξάνεται με αύξηση του χημικού δυναμικού και φτάνει τη μέγιστη τιμή της όταν το χημικό δυναμικό πάρει τη μέγιστη τιμή του ,γίνει δηλαδή $\mu = \epsilon_0$. Τη μέγιστη τιμή της θερμικής συνιστώσας την ονομάζουμε κρίσιμη τιμή η οποία ισούται με $N_c = N_T(T, \mu = \epsilon_0)$. Βέβαια δεν πρέπει να παραβλέψουμε και το γεγονός ότι καθώς $\mu \rightarrow \epsilon_0$ ο αριθμός N_0 αποκλίνει [1].

Αν $N_c > N$ τότε η σχέση (3.1.27) ικανοποιείται για μικρές τιμές του χημικού δυναμικού αφού όλα τα σωματίδια “χωράνε” να καταλάβουν τις διεγερμένες καταστάσεις. Συνεπώς αφού $\mu < \varepsilon_0$ τότε και $N_0 \simeq 1$ άρα δεν υπάρχει συμπύκνωμα.

Αν $N_c < N$ τότε η κατάσταση διαφοροποιείται ριζικά. Επειδή η κρίσιμη τιμή είναι αύξουσα συνάρτηση της θερμοκρασίας σημαίνει ότι για να έχει μικρή τιμή και η θερμοκρασία του αερίου θα είναι μικρή. Συνεπώς θα πρέπει $\mu = \varepsilon_0$ ώστε να μεγαλώσει η τιμή του N_0 για να “χωρέσουν” εκεί τα σωματίδια. Απο τα παραπάνω γίνεται εμφανής η ανάγκη ορισμού μιας κρίσιμης θερμοκρασίας T_c της οποίας ο προφανής ορισμός με βάση τη προηγούμενη ανάλυση είναι:

$$N_c(T_c, \mu = \varepsilon_0) = N \quad (3.1.28)$$

Τώρα πλέον που έχουμε ορίσει τα βασικά μεγέθη που χρειαζόμαστε μπορούμε να εφαρμόσουμε το παραπάνω φορμαλισμό στο σύστημα του ιδανικού αερίου μποζόνιων παγιδευμένα σε κουτί όγκου V και να εξάγουμε πλέον ακριβή αποτελέσματα τόσο για τη κρίσιμη θερμοκρασία όσο και για το λόγο του συμπυκνώματος. Όπως έχουμε προαναφέρει η χρησιμότητα του είναι μεγάλη διότι αποτελεί ένα απο τα λίγα φυσικά συστήματα τα οποία επιλύονται αναλυτικά και παράλληλα εξάγουν σημαντικά αποτελέσματα.

3.2 Ιδανικό αέριο σε κουτί

Έχοντας πλέον στη διάθεση μας το θεωρητικό υπόβαθρο, μελετάμε στη παράγραφο αυτή το ιδανικό αέριο μποζονίων σε κουτί όγκου V με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Στη περίπτωση αυτή η χαμιλτονιανή του καθενός σωματιδίου είναι $\hat{H}^{(1)} = \frac{\vec{p}^2}{2m}$ με ιδιοτιμή $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$.

Οι ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής αυτής είναι $\varphi_{\vec{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}}$ με $V = L^3$ και $\vec{p} = \frac{2\pi\hbar\vec{n}}{L}$ λόγω των περιοδικών συνοριακών συνθηκών.

Αρχικά υπολογίζουμε τον αριθμό των ατόμων της θερμικής συνιστώσας του αερίου, αυτών δηλαδή που είναι εκτός του συμπυκνώματος. Έχουμε λοιπόν:

$$N_T = \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i = \sum_{\vec{p} \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)} - 1} \quad (3.2.1)$$

Στο σημείο αυτό κάνουμε την αντικατάσταση $\sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p}$ και άρα:

$$N_T = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \frac{1}{e^{\beta(\frac{p^2}{2m} - \mu)} - 1} \quad (3.2.2)$$

με $\vec{p} \neq 0$. Για το χημικό δυναμικό η σχέση περιορισμού (3.1.24) δίνει $\mu < 0$ αφού $\varepsilon_0 = 0$.

Για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα κάνουμε την αλλαγή μεταβλητών $p^2 = 2mk_B T x$ και χρησιμοποιώντας σφαιρικές συντεταγμένες καταλήγουμε στο ακόλουθο αποτέλεσμα:

$$N_T = \frac{V 4\pi\sqrt{2}(mk_B T)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} \quad (3.2.3)$$

Το ολοκλήρωμα που προέκυψε αποτελεί ειδική περίπτωση μιας γενικής κατηγορίας συναρτήσεων που καλούνται συναρτήσεις Bose και οι οποίες έχουν τη γενική μορφή:

$$g_p(z) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^\infty dx \frac{x^{p-1}}{z^{-1}e^x - 1} \quad (3.2.4)$$

όπου $z = e^{\beta\mu}$. Παρατηρούμε ότι θέτωντας $p = \frac{3}{2}$ στη παραπάνω έκφραση έχουμε

$$g_{3/2}(z) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} \quad (3.2.5)$$

ή καλύτερα

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{z^{-1}e^x - 1} = g_{3/2}(z) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (3.2.6)$$

με $\Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$.

Συνεπώς ο αριθμός των σωματιδίων εκτός συμπυκνώματος είναι

$$N_T = \frac{V}{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^{3/2}} g_{3/2}(z) = \frac{V}{\lambda_T^3} g_{3/2}(e^{\beta\mu}) \quad (3.2.7)$$

με $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$ το θερμικό μήκος κύματος. Η κρίσιμη θερμοκρασία υπολογίζεται από τη σχέση (3.1.28). Δηλαδή ισχύει

$$N_c(T_c, \mu = 0) = N \quad (3.2.8)$$

η οποία μέσω της (3.2.7) δίνει:

$$\frac{V}{\lambda_{T_c}^3} g_{3/2}(1) = N \quad (3.2.9)$$

Αν τώρα αντικαταστήσουμε και το θερμικό μήκος κύματος παίρνουμε:

$$k_B T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left(\frac{n}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} \quad (3.2.10)$$

όπου $n = \frac{N}{V}$ η πυκνότητα των σωματιδίων.

- Για $T > T_c$ δεν έχουμε την εμφάνιση του συμπυκνώματος διότι η θερμοκρασία είναι αρκετά υψηλή ώστε όλα τα σωματίδια να βρίσκονται στις διεγερμένες καταστάσεις συνεπώς $N_0 \simeq 1$ και $N = N_T$ η οποία μέσω της (3.2.7) μας δίνει $g_{3/2}(z) = n\lambda_T^3$.
- Για $T < T_c$ έχουμε την ύπαρξη συμπυκνώματος και δείξαμε ότι πρέπει το χημικό δυναμικό να λάβει τη μέγιστη τιμή του, δηλαδή $\mu = \varepsilon_0 = 0$. Με βάση αυτή τη παρατήρηση ο αριθμός των ατόμων εκτός συμπυκνώματος είναι

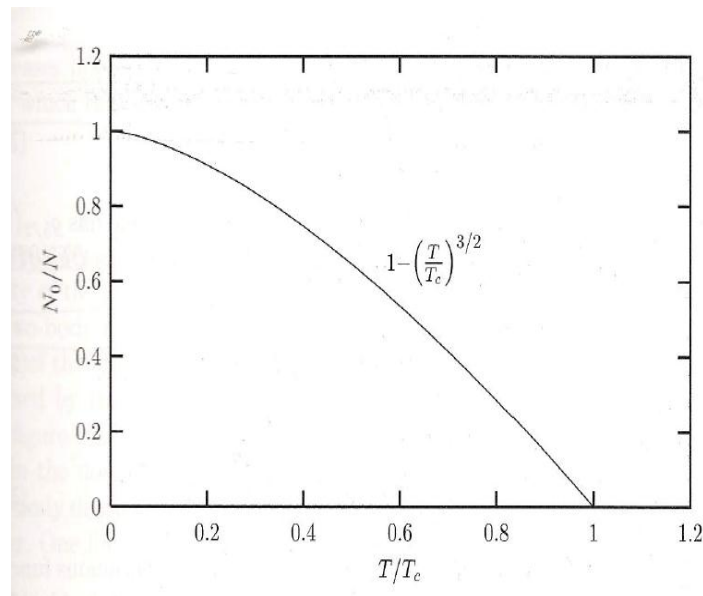
$$N_T = \frac{V}{\lambda_{T_c}^3} g_{3/2}(1) = \frac{V}{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^{3/2}} g_{3/2}(1) \quad (3.2.11)$$

ο οποίος μέσω της σχέσης (3.2.10) γίνεται

$$N_T = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} N \quad (3.2.12)$$

Σκοπός μας είναι να υπολογίσουμε το πηλίκο συμπυκνώματος και για να το πετύχουμε αρκεί να θυμηθούμε ότι πρέπει πάντα να ισχύει η ισότητα

$$N = N_0 + N_T \quad (3.2.13)$$



Σχήμα 3.2: Ο λόγος συμπυκνώματος σε συνάρτηση με τη θερμοκρασία για το ιδανικό αέριο μποζονίων.

Συνεπώς με αντικατάσταση της (3.2.12) στη (3.2.13) έχουμε:

$$N_0 = N - N_T = N - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} N \quad (3.2.14)$$

ή

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad (3.2.15)$$

Παρατηρώντας τη σχέση (3.2.15) εμφανίζεται αυτό ακριβώς που είπαμε στην αρχή ότι δηλαδή κατά τη παρουσία του συμπυκνώματος στο αέριο, ο αριθμός των ατόμων που βρίσκονται στη συμπυκνωμένη φάση γίνεται μακροσκοπικός και συγκρίσιμος με τον ολικό αριθμό σωματιδίων. Στο ιδανικό αέριο που μελετάμε ο λόγος $\frac{N_0}{N}$ είναι αυτός που λειτουργεί σαν τη παράμετρο τάξης του συστήματος. Ανάλογα με το ποιά είναι η τιμή του αντιλαμβάνομαστε αν υπάρχει συμπύκνωμα στο αέριο ή όχι. Στο σχήμα φαίνεται και το γράφημα του λόγου συμπυκνώματος σε σχέση με τη θερμοκρασία.

Η ενέργεια του αερίου υπολογίζεται από τη σχέση (3.1.19) κάνοντας πάλι την αλλαγή μεταβλητών $p^2 = 2mk_B T x$ και την αντικατάσταση $\sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p}$. Τότε βρίσκουμε ότι η

ενέργεια του αερίου για $T > T_c$ είναι

$$E = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(z) \quad (3.2.16)$$

ενώ για $T < T_c$ αλλάζει και γίνεται

$$E = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} g_{5/2}(1) \quad (3.2.17)$$

Από τη στατιστική μηχανική γνωρίζουμε ότι ένα αέριο σε τρεις διαστάσεις ικανοποιεί την εξίσωση

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V} \quad (3.2.18)$$

Στη περίπτωση που $T < T_c$ η εξίσωση αυτή αλλάζει και μέσω της (3.2.17) γίνεται

$$P = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} g_{5/2}(1) \quad (3.2.19)$$

Μελετώντας τη τελευταία σχέση παρατηρούμε ότι η πίεση του αερίου δεν εξαρτάται από τον όγκο και άρα το σύστημα έχει άπειρη συμπιεστότητα. Φυσικά αυτή η συμπεριφορά δεν μπορεί να ισχύει και πράγματι όπως διαπιστώνουμε στο επόμενο κεφάλαιο αλλάζει με την εισαγωγή των αλληλεπιδράσεων.

Μια ακόμα συμπεριφορά του ιδανικού αερίου η οποία οφείλεται στο γεγονός ότι δεν έχουμε λάβει υπόψιν τις αλληλεπιδράσεις είναι ότι όταν $T \rightarrow 0$ όλα τα άτομα έχουν μεταβεί στη θεμελιώδη κατάσταση, δηλαδή $N = N_0$ όπως εύκολα φαίνεται από την (3.2.15).

Στη περίπτωση του ιδανικού αερίου που μελετάμε μπορούμε αρκετά εύκολα να υπολογίσουμε το πίνακα πυκνότητας ενός σώματος και να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα που βγάζουμε με αυτά του προηγούμενου κεφαλαίου τα οποία ήταν εντελώς θεωρητικά. Ο πίνακας πυκνότητας συναρτήσεως των καταστάσεων βάσης γράφεται μέσω της (2.1.10) ως

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i \bar{n}_i \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) = \bar{n}_0 \varphi_0^*(\vec{r}_1) \varphi_0(\vec{r}_2) + \sum_{i \neq 0} \bar{n}_i \varphi_i^*(\vec{r}_1) \varphi_i(\vec{r}_2) \quad (3.2.20)$$

- Για $T > T_c$, που δεν έχουμε συμπύκνωση, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$n^{(1)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\vec{p} \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(p^2/2m - \mu)} - 1} e^{-i \frac{\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}} \quad (3.2.21)$$

ή

$$n^{(1)}(s) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp \frac{1}{e^{\beta(p^2/2m - \mu)} - 1} e^{-i \frac{\vec{p} \cdot \vec{s}}{\hbar}} \quad (3.2.22)$$

όπου $\varphi_i(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{\sqrt{V}}$.

- Για $T < T_c$ υπάρχει το συμπύκνωμα συνεπώς $\mu = \varepsilon_0 = 0$ και η (3.2.20) με όμοιο τρόπο γίνεται

$$n^{(1)}(s) = \frac{N_0}{V} + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dp \frac{1}{e^{\beta(p^2/2m-\mu)} - 1} e^{-i\frac{\vec{p}\cdot\vec{s}}{\hbar}} \quad (3.2.23)$$

Όπως στο δεύτερο κεφάλαιο έτσι και εδώ παρατηρούμε ότι για $s \rightarrow \infty$ ο πίνακας πυκνότητας τείνει στο μηδέν απουσία συμπυκνώματος ενώ τείνει στη τιμή $n = \frac{N_0}{V}$ όταν στο αέριο παρατηρείται το συμπύκνωμα.

Συμπύκνωμα σε χαμηλότερες διαστάσεις: Στην μέχρι τώρα ανάλυση, δεν αναφέραμε πουθενά το ρόλο της πυκνότητας των ενεργειακών καταστάσεων στο σχηματισμό του συμπυκνώματος. Η πυκνότητα των καταστάσεων για ένα d – διάστατο ομογενές σύστημα μεγέθους L είναι:

$$\rho(\varepsilon) = \Omega_d \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{d/2} \varepsilon^{\frac{d}{2}-1} \quad (3.2.24)$$

με Ω_d σταθερά η τιμή της οποίας εξαρτάται από τις διαστάσεις του συστήματος.

Για το τρισδιάστατο σύστημα η πυκνότητα καταστάσεων καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$ τείνει στο μηδέν ενώ στις δύο διαστάσεις παραμένει σταθερή και στη μία αποκλίνει στο ίδιο όριο. Αυτή η διαφορά έχει ως αποτέλεσμα η κρίσιμη θερμοκρασία να παραμένει πεπερασμένη μόνο στις τρεις διαστάσεις. Η συμπεριφορά αυτή μπορεί να αρθεί παρουσία δυναμικού παγίδευσης $V(r)$ διότι τότε το μέγεθος του συστήματος L εξαρτάται από την ενέργεια. Ας υποθέσουμε ότι το δυναμικό είναι της μορφής:

$$V(x) = V_0 \left(\frac{|x|}{L}\right)^\eta \quad (3.2.25)$$

τότε το μέγεθος του συστήματος γίνεται $L(\varepsilon) = L \left(\frac{\varepsilon}{V_0}\right)^{1/\eta}$. Στην περίπτωση αυτή η πυκνότητα των καταστάσεων γίνεται ανάλογη με $\rho(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\frac{d}{\eta} + \frac{d}{2} - 1}$ και ο εκθέτης, με κατάλληλη επιλογή του η μπορεί πλέον να γίνει θετικός ώστε καθώς $\varepsilon \rightarrow 0$ και $\rho(\varepsilon) \rightarrow 0$. Το συμπύκνωμα συνεπώς υπάρχει για $0 < \eta < 2$ στα μονοδιάστατα συστήματα και για $\eta > 0$ στα διδιάστατα.

3.3 Ιδανικό αέριο παρουσία αρμονικού δυναμικού

Μια ακόμα ενδιαφέρουσα περίπτωση, η οποία βρίσκει εφαρμογή στα πειράματα που αφορούν συμπυκνώματα αραιών αερίων παρουσία μαγνητικής και οπτικής παγίδας, είναι αυτή του

ιδανικού αερίου παρουσία εξωτερικού δυναμικού τύπου αρμονικού ταλαντωτή [9]. Υποθέτουμε ότι το αέριο είναι παγιδευμένο από εξωτερικό δυναμικό τρισδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή της μορφής:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \quad (3.3.1)$$

Τότε η ενέργεια του κάθε ατόμου είναι:

$$\varepsilon_{\vec{l}} = \hbar\omega_x l_x + \hbar\omega_y l_y + \hbar\omega_z l_z \quad (3.3.2)$$

όπου η ενέργεια $\frac{\hbar}{2}(\omega_x + \omega_y + \omega_z)$ έχει απορροφηθεί στον ορισμό του χημικού δυναμικού. Για να απλοποιήσουμε τις πράξεις μπορούμε να θεωρήσουμε τη περίπτωση ισοτροπικού ταλαντωτή ώστε $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$. Συνεπώς η ενέργεια του κάθε ατόμου τώρα γίνεται $\varepsilon_{\vec{l}} = \hbar\omega l$ με $l = l_x + l_y + l_z$.

Ο μέσος αριθμός κατάληψης της κάθε μονοσωματιδιακής κατάστασης είναι τώρα:

$$n_{\vec{l}} = \frac{1}{e^{\beta(\hbar\omega l - \mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega l} z^{-1} - 1} \quad (3.3.3)$$

ή μετά από μερικές πράξεις:

$$n_{\vec{l}} = \left(\frac{e^{\beta\hbar\omega l}}{z} - 1 \right)^{-1} \quad (3.3.4)$$

Ο αριθμός των ατόμων στη θεμελιώδη κατάσταση $l = 0$ είναι $N_0 = n_0 = \left(\frac{1}{z} - 1\right)^{-1}$ όπου πάλι βλέπουμε ότι για $\mu \rightarrow \varepsilon_0 = 0$ ή για $z \rightarrow 1$ μεγαλώνει πολύ και προσεγγίζει μακροσκοπικές τιμές συγκρίσιμες με αυτή του ολικού αριθμού των ατόμων. Αντιλαμβανόμαστε ότι πάλι αρχίζει να διαφαίνεται η ύπαρξη του συμπυκνώματος. Στόχος μας είναι να προσδιορίσουμε πάλι το λόγο συμπυκνώματος και να διαπιστώσουμε τις τυχόν αλλαγές με το αέριο μποζονίων σε κουτί. Τα άτομα που βρίσκονται στις διεγερμένες καταστάσεις είναι:

$$N_T = \sum_{\vec{l} \neq 0} \left(\frac{e^{\beta\hbar\omega l}}{z} - 1 \right)^{-1} \quad (3.3.5)$$

Ο αριθμός αυτός για σταθερή θερμοκρασία αυξάνει καθώς αυξάνει το χημικό δυναμικό και αποκτά τη μέγιστη τιμή του $N_c = N_T(T, z = 1)$ όταν $z \rightarrow 1$. Πράγματι:

$$N_T = \sum_{\vec{l} \neq 0} \left(\frac{e^{\beta\hbar\omega l}}{z} - 1 \right)^{-1} < \sum_{\vec{l} \neq 0} (e^{\beta\hbar\omega l} - 1)^{-1} = N_c \quad (3.3.6)$$

Μέσω της ισότητας $\frac{1}{e^x-1} = \frac{e^{-x}}{1-e^{-x}} = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-kx}$ ο μέγιστος αριθμός N_c γίνεται:

$$N_c = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\vec{l} \neq 0} e^{-k\beta\hbar\omega l} = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\vec{l} \neq 0} e^{-k\beta\hbar\omega \sum_a l_a} \quad (3.3.7)$$

με $a = x, y, z$. Επειδή $l_x = l_y = l_z$ τελικά έχουμε:

$$N_c = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{1 - e^{-k\beta\hbar\omega}} \right)^3 \quad (3.3.8)$$

Όταν $k_B T \gg \hbar\omega$ μπορούμε να αναπτύξουμε κατά Taylor το εσωτερικό του αθροίσματος και να βρούμε:

$$\left(\frac{1}{1 - e^{-x}} \right)^3 = \left(\frac{1}{1 - (1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \dots)} \right)^3 = \left(\frac{1}{x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - \dots} \right)^3 \quad (3.3.9)$$

ή

$$\left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - \dots \right)^{-3} = x^{-3} \left(1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} - \dots \right)^{-3} = x^{-3} \left(1 + \frac{3x}{2} - \dots \right) = \frac{1}{x^3} + \frac{3}{2x^2} - \dots \quad (3.3.10)$$

Μέσω της (3.310) η (3.3.8) προκύπτει να είναι:

$$N_c = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k_B T}{k\hbar\omega} \right)^3 + \frac{3}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k_B T}{k\hbar\omega} \right)^2 \quad (3.3.11)$$

ή

$$N_c = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^3} + \frac{3}{2} \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \quad (3.3.12)$$

Τα αθροίσματα υπολογίζονται εύκολα από τις γνωστές συναρτήσεις Bose οι οποίες είναι ίσες με:

$$g_p(z) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{p-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m^p} \quad (3.3.13)$$

οπότε για $z = 1$ έχουμε

$$g_p(1) = \zeta(p) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^p} \quad (3.3.14)$$

Τελικά η (3.3.12) γίνεται μέσω της (3.3.14)

$$N_c = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^3 \zeta(3) + \frac{3}{2} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega}\right)^2 \zeta(2) + \dots \quad (3.3.15)$$

Ο λόγος συμπυκνώματος είναι συνεπώς:

$$\frac{N_0}{N} \simeq \frac{N - N_c}{N} = 1 - \frac{N_c}{N} \simeq 1 - \frac{\left(k_B T / \hbar \omega\right)^3 \zeta(3)}{N} \quad (3.3.16)$$

ή για να φανεί καλύτερα [9]

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c^0}\right)^3 \quad (3.3.17)$$

όπου T_c^0 η κρίσιμη θερμοκρασία η οποία ορίζεται απο τη σχέση

$$\left(\frac{k_B T_c^0}{\hbar \omega}\right)^3 = \frac{N}{\zeta(3)} \quad (3.3.18)$$

Η παραπάνω ανάλυση αφορά προφανώς τις θερμοκρασίες οι οποίες είναι χαμηλότερες απο τη κρίσιμη ώστε να έχει νόημα η έννοια του συμπυκνώματος. Παρατηρούμε ότι στη περίπτωση του αρμονικού δυναμικού η σχέση του λόγου συμπυκνώματος άλλαξε συγκριτικά με την (3.2.15).

Κεφάλαιο 4

Αέριο Μποζονίων με αλληλεπιδράσεις

Έως τώρα στο προηγούμενο κεφάλαιο ασχοληθήκαμε αποκλειστικά με το ιδανικό αέριο μποζονίων καθώς και με την εξαγωγή μερικών χρήσιμων συμπερασμάτων κυρίως για τη τιμή της κρίσιμης θερμοκρασίας κάτω από την οποία εμφανίζεται το συμπύκνωμα. Παρατηρήσαμε όμως ότι το ιδανικό αέριο είχε μερικά προβλήματα όπως ότι εμφάνιζε άπειρη συμπίεστικότητα εξαιτίας της μη εξάρτησης της πίεσης από τον όγκο. Για να μπορέσουμε να λύσουμε τέτοιου είδους προβλήματα στο κεφάλαιο αυτό εισάγουμε αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων. Έτσι στο κεφάλαιο αυτό αρχικά αναφέρουμε τους περιορισμούς που ικανοποιούν τα αέρια που μελετάμε, στη συνέχεια αναλύουμε το ομογενές αέριο αλληλεπιδρώντων ατόμων και τέλος εξάγουμε τη περίφημη εξίσωση Gross–Pitaevskii η οποία περιγράφει τα μη ομογενή αέρια.

4.1 Στοιχεία θεωρίας σκέδασης

Θεωρούμε τη περίπτωση της σκέδασης δύο μη σχετικιστικών και χωρίς σπίν ατόμων με μάζα m το καθένα. Κατά τη διάρκεια της σκέδασης υποθέτουμε ότι τα δύο σωματίδια αλληλεπιδρούν μέσω ενός δυναμικού $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Στη περίπτωση που το δυναμικό αλληλεπίδρασης των ατόμων εξαρτάται μόνο από το μέτρο της σχετικής τους απόστασης δηλαδή $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(r)$ με $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ μπορούμε να ξεχωρίσουμε τη κίνηση του κέντρου μάζας, το οποίο κινείται σαν ελεύθερο σωματίο μάζας $M = 2m$ και δεν θα το λάβουμε υπόψη στη περαιτέρω θεώρηση του προβλήματος, από τη σχετική κίνηση των δύο σωματιδίων η οποία ικανοποιεί την εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(r) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (4.1.1)$$

με $\mu = m/2$ την ανηγμένη μάζα των ατόμων. Άρα το πρόβλημα της σκέδασης των δύο ατόμων έχει αναχθεί στην επίλυση της παραπάνω εξίσωσης, η οποία περιγράφει τη σκέδαση ενός σωματιδίου από κάποιο δυναμικό $V(r)$ όπου r η απόσταση του σωματιδίου από το κέντρο του δυναμικού. Υποθέτουμε ότι το δυναμικό έχει κάποιο πεπερασμένο εύρος ακτίνας b . Δηλαδή η αλληλεπίδραση του ατόμου με το δυναμικό συμβαίνει μόνο στη περιοχή με $r < b$ ενώ $r > b$ έχουμε $V(r) = 0$.

Για να επιλύσουμε την (4.1.1) αρχικά τη γράφουμε στη μορφή:

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \quad (4.1.2)$$

Η γενική λύση της ανωτέρω διαφορικής εξίσωσης προκύπτει να είναι :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_{inc}(\vec{r}) + \Psi_{sc}(\vec{r}) \quad (4.1.3)$$

ή

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_{inc}(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (4.1.4)$$

όπου $G(\vec{r} - \vec{r}')$ είναι η συνάρτηση Green που αντιστοιχεί στο τελεστή $(\nabla^2 + k^2)$ και $\Psi_{inc}(\vec{r})$ ονομάζουμε η λύση η οποία ικανοποιεί την ομογενή εξίσωση

$$(\nabla^2 + k_0^2) \Psi_{inc}(\vec{r}) = 0 \quad (4.1.5)$$

Προφανώς η λύση της (4.1.5) δεν είναι άλλη από τα επίπεδα κύματα $\Psi_{inc}(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}_0\vec{r}}$. Μέσω της θεωρίας των συναρτήσεων Green αποδεικνύεται ότι η συνάρτηση $G(\vec{r} - \vec{r}')$ περιγράφει εισερχόμενα σφαιρικά κύματα και είναι ίση με:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (4.1.6)$$

Συνεπώς η γενική λύση της εξίσωσης (4.1.2) προκύπτει να είναι:

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}_0\vec{r}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (4.1.7)$$

Μπορούμε να βρούμε την ασυμπτωτική μορφή της (4.1.7) αν θεωρήσουμε ότι $r \gg b$. Συγκεκριμένα μπορούμε μέσω αναπτύγματος Taylor να γράψουμε:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \simeq r - \vec{r}' \cdot \vec{n} \quad (4.1.8)$$

όπου με $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$ συμβολίζουμε τη διεύθυνση της σκέδασης. Άρα η ασυμπτωτική μορφή της (4.1.7) είναι [20]:

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{\vec{k}}(\vec{n}) \quad (4.1.9)$$

στην οποία ο παράγοντας $f_{\vec{k}}(\vec{n})$, ο οποίος καλείται πλάτος σκέδασης, δεν εξαρτάται πλέον από την απόσταση $|\vec{r} - \vec{r}'|$ και ισούται με:

$$f_{\vec{k}}(\vec{n}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' e^{ik\vec{n} \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (4.1.10)$$

Στο σημείο αυτό μπορούμε να αναπτύξουμε τις υποθέσεις που θεωρούμε για τα αέρια που μελετάμε:

- Αρχικά υποθέτουμε ότι το εύρος των ενδοατομικών δυνάμεων είναι αρκετά μικρότερο από την απόσταση μεταξύ των ατόμων, δηλαδή $\rho^{-1/\beta} \gg b$ με ρ την πυκνότητα των ατόμων, ώστε τα αέρια να θεωρούνται αραιά και άρα να μπορούμε να θεωρούμε αλληλεπιδράσεις μόνο μεταξύ ζευγαριών σωματιδίων (two-body interactions). Το γεγονός ότι τα αέρια είναι αραιά μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε την ασυμπτωτική μορφή της κυματοσυνάρτησης της σχετικής τους κίνησης και συνεπώς να μπορούμε να εκφράσουμε όλες τις ιδιότητες των αερίων μέσω του πλάτους σκέδασης χωρίς να μας ενδιαφέρει η ακριβής μορφή του δυναμικού αλληλεπίδρασης των ατόμων [1,4,5].
- Επιπλέον απλούστευση προέρχεται από το γεγονός ότι οι κρούσεις μεταξύ των ατόμων γίνονται στο όριο των χαμηλών ενεργειών/θερμοκρασιών. Στις ενέργειες αυτές το πλάτος σκέδασης $f_{\vec{k}}(\vec{n})$ δεν εξαρτάται πλέον από τη διεύθυνση σκέδασης \vec{n} και έτσι το ασυμπτωτικό μέρος της κυματοσυνάρτησης $\Psi(\vec{r})$ (αυτό δηλαδή που συνδέεται με τη σκέδαση) γίνεται σφαιρικά συμμετρικό ακόμα και αν το δυναμικό δεν είναι. Τότε στο όριο που $k \rightarrow 0$ μπορούμε με ασφάλεια να αντικαταστήσουμε το πλάτος σκέδασης με τη σταθερή τιμή $f_{\vec{k}}(\vec{n}) \rightarrow a$. Στο όριο αυτό λέμε ότι έχουμε s-wave scattering με τη σταθερή ποσότητα a να την ονομάζουμε s-wave scattering length. Με βάση τις δύο προηγούμενες υποθέσεις συμπεραίνουμε ότι το μήκος σκέδασης a είναι η μόνη παράμετρος της θεωρίας μας η οποία περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων [1,4,5].

4.2 Θεωρία Bogoliubov

Όπως παρατηρήσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο κατά την ύπαρξη του συμπυκνώματος το αέριο παρουσιάζει άπειρη συμπίεστικότητα γεγονός που οφείλεται στην απουσία αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων. Ο πρώτος ο οποίος εισήγαγε τις αλληλεπιδράσεις και τις αντιμετώπισε με συστηματικό τρόπο ήταν ο Bogoliubov το 1947 εφαρμόζοντας μια νέα θεωρία διαταραχών η οποία αποτελεί ως και τις μέρες μας τη βάση των σύγχρονων θεωριών μελέτης του BEC .

4.2.1 Χαμηλής τάξης προσέγγιση

Θεωρούμε ότι το σύστημα μας αποτελείται από N χωρίς σπίν μποζόνια τα οποία αλληλεπιδρούν ανα δύο μέσω ενός δυναμικού $v(\vec{x} - \vec{x}')$. Η χαμιλτονιανή του συστήματος αυτού στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης, όπως έχει αποδειχθεί στο πρώτο κεφάλαιο, είναι:

$$\hat{H} = \int d\vec{x} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \hat{\Psi}(\vec{x}) + \frac{1}{2} \int d\vec{x} d\vec{x}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}') v(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\Psi}(\vec{x}) \hat{\Psi}(\vec{x}') \quad (4.2.1)$$

Επειδή το σύστημα είναι ομογενές μια χρήσιμη βάση συναρτήσεων της οποίας μπορούν να γραφούν οι πεδιακοί τελεστές είναι τα επίπεδα κύματα. Δηλαδή ισχύει:

$$\hat{\Psi}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}/\hbar} \quad , \quad \hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{x}/\hbar} \quad (4.2.2)$$

όπου V ο όγκος που καταλαμβάνει το σύστημα. Μέσω του μετασχηματισμού αυτού η (4.2.1) γίνεται:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} v(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'} \quad (4.2.3)$$

με $v(\vec{q}) = \int d\vec{x} e^{-i\vec{q}\vec{x}/\hbar} v(\vec{x})$ το μετασχηματισμό Fourier του δυναμικού. Προφανώς οι τελεστές ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$\left[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \right] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \quad , \quad \left[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'} \right] = \left[\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger, \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \right] = 0 \quad (4.2.4)$$

Στα πραγματικά συστήματα των αερίων η ακριβής έκφραση του δυναμικού αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων είναι πολύ δύσκολο να βρεθεί και αν βρεθεί είναι ακόμα δυσκολότερη η μελέτη του. Όμως επειδή μελετάμε αραιά αέρια σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, των οποίων οι ιδιότητες περιγράφονται πλήρως από το μήκος σκέδασης a , μπορούμε αντί του ακριβούς δυναμικού να χρησιμοποιήσουμε ένα ενεργό δυναμικό για να μελετήσουμε τις μακροσκοπικές ιδιότητες των αερίων αρκεί το δυναμικό αυτό να μας δίνει τη σωστή τιμή του μήκους σκέ-

δασης. Ακόμα επειδή στο όριο των χαμηλών θερμοκρασιών που βρισκόμαστε μόνο μικρές τιμές της ορμής λαμβάνουν μέρος μπορούμε στο μετασχηματισμό Fourier του δυναμικού να λάβουμε υπόψιν μόνο τη τιμή $q = 0$ και συνεπώς να βρούμε:

$$v(0) = \int d\vec{x} v_{eff}(x) \quad (4.2.5)$$

Έτσι η σχέση (4.2.3) γίνεται τελικά:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{k^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{v(0)}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} v(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'} \quad (4.2.6)$$

Επειδή η χαμηλότερη ενέργειακή κατάσταση είναι κατειλημμένη μακροσκοπικά και επειδή το ενεργό δυναμικό είναι "όμαλό" ακόμα και σε μικρές αποστάσεις μπορούμε να μην λάβουμε υπόψιν τις όποιες κβαντικές διακυμάνσεις και να εφαρμόσουμε τη προσέγγιση Bogoliubov για τους τελεστές \hat{a}_0 και \hat{a}_0^\dagger . Δηλαδή να κάνουμε την αντικατάσταση:

$$\hat{a}_0 \equiv \sqrt{N_0} \quad (4.2.7)$$

Ακόμα, επειδή αναφερόμαστε σε αραιά και σε χαμηλές θερμοκρασίες αέρια, παρόλο που υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μπορούμε να θεωρήσουμε προσεγγιστικά ότι όλα τα άτομα βρίσκονται στη θεμελιώδη τους κατάσταση, δηλαδή ότι $N_0 \sim N$ το οποίο έχει ως αποτέλεσμα στη χαμιλτονιανή (4.2.5) να πάρουμε μόνο τους όρους με $\vec{k} = 0$. Άρα με όλες αυτές τις θεωρήσεις η (4.2.5) γίνεται:

$$E_0 = \frac{N^2 v(0)}{2V} \quad (4.2.8)$$

όπου E_0 είναι η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης του συστήματος στη χαμηλότερη τάξης προσέγγιση. Από τη θεωρία σκέδασης μπορούμε στη πρώτη προσέγγιση Born να γράψουμε το δυναμικό σαν $v(0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ με a το μήκος σκέδασης. Οπότε η (4.2.7) τελικά μετατρέπεται σε:

$$E_0 = \frac{1}{2} N n g \quad (4.2.9)$$

όπου $n = \frac{N}{V}$ και $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ η σταθερά αλληλεπιδράδης η οποία όπως θα διαπιστώσουμε στα επόμενα κεφάλαια παίζει σπουδαίο ρόλο. Η εισαγωγή των αλληλεπιδράσεων και η μετάβαση του αερίου απο ιδανικό σε μη είχε ως αποτέλεσμα το αέριο να μην εμφανίζει την άπειρη συμπίεστικότητα. Πράγματι η πίεση του αερίου τώρα είναι:

$$P = -\frac{\partial E_0}{\partial V} = \frac{1}{2} n^2 g \quad (4.2.10)$$

η οποία όπως παρατηρούμε εξαρτάται πλέον απο τον όγκο του συστήματος. Η συμπερι-
στικότητα του αερίου δίνεται απο τη σχέση $\frac{\partial n}{\partial P} = \frac{1}{mc^2}$ με $c = \sqrt{\frac{gn}{m}}$ τη ταχύτητα του ήχου.
Τελειώνοντας την ανάλυση πρέπει να σημειώσουμε ότι για να είναι το αέριο σταθερό απο
θερμοδυναμική σκοπιά η συμπεριστικότητα οφείλει να θετική δηλαδή $\frac{\partial n}{\partial P} > 0$ ή $g > 0$. Συνε-
πώς το συμπύκνωμα σε ομογενές και αραιό αέριο θα επιζήσει μόνο στη περίπτωση που οι
αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων είναι απωστικές αλλιώς θα έχουμε κατάρρευση. Η μόνη
περίπτωση που το συμπύκνωμα παραμένει σταθερό ακόμα και αν $g < 0$ είναι όταν έχουμε
εξωτερικά πεδία όπως συμβαίνει στα πειράματα.

4.2.2 Ανώτερης τάξης προσέγγιση

Στη παράγραφο αυτή μελετάμε το ασθενώς αλληλεπιδρών αέριο μποζονίων με μεγαλύτερη
ακρίβεια. Συγκεκριμένα αναπτύσσουμε διαταρακτική θεωρία ως προς τους τελεστές κατα-
στροφής και δημιουργίας κρατώντας μέχρι και τετραγωνικούς όρους. Ξεκινάμε πάλι από τη
χαμιλτονιανή (4.2.5) και αναλύουμε κάθε όρο ξεχωριστά [1,3].

- Ο όρος της κινητικής ενέργειας είναι ιδιαίτερα απλός και γίνεται:

$$\sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} = \varepsilon_0 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \quad (4.2.11)$$

με $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{k^2}{2m}$. Προφανώς απλά ξεχωρίσαμε τη συνεισφορά του συμπυκνώματος από
αυτή των ατόμων στις διεγερμένες καταστάσεις.

- Ο όρος της δυναμικής ενέργειας είναι αρκετά πιο ενδιαφέρον. Από τη (4.2.5) παρατη-
ρούμε ότι στον όρο της δυναμικής ενέργειας πρέπει να αθροίσουμε σε όλες τις δυνατές
τιμές των $\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}$. Για $\vec{k} = \vec{k}' = \vec{q} = 0$ έχουμε το πρώτο όρο ο οποίος είναι $\frac{v(0)N_0^2}{2V}$. Οι
αμέσως επόμενοι επιτρεπτοί όροι είναι αυτοί που έχουν δύο απο τους τέσσερις δείκτες
μηδενικούς και τους άλλους δύο μη μηδενικούς. Οι όροι αυτοί είναι έξι και προκύπτουν
από τους εξής συνδυασμούς: $\vec{k} = \vec{k}' = 0, \vec{k} = \vec{k}' - \vec{q} = 0, \vec{k} = \vec{k} + \vec{q} = 0, \vec{k}' = \vec{q} =$
 $0, \vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} = 0, \vec{k}' - \vec{q} = \vec{k} + \vec{q} = 0$

Συνοψίζοντας, η χαμιλτονιανή αποκτά τη παρακάτω προσεγγιστική μορφή:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{v(0)}{2V} (N_0^2 + 2N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}) + N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} v(\vec{k}) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{N_0}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} v(\vec{k}) (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{-\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}) \quad (4.2.12)$$

Όμως για τον ολικό αριθμό των ατόμων ισχύει:

$$\hat{N} = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} = N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \quad (4.2.13)$$

ή

$$\hat{N}^2 = N_0^2 + 2N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \quad (4.2.14)$$

όπου κρατήσαμε μέχρι τετραγωνικούς όρους ως προς τους τελεστές και εφαρμόσαμε τη προσέγγιση Bogoliubov. Άρα η χαμιλτονιανή (4.2.11) μέσω της σχέσης (4.2.13) και του περιορισμού $\hat{N} = N$ παίρνει τη τελική της μορφή:

$$\hat{H} = \frac{n^2 v(0)V}{2} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{nv(\vec{k})}{2} (\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{-\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}) \right\} \quad (4.2.15)$$

όπου $n = \frac{N}{V}$ η πυκνότητα των σωματιδίων.

Παρατηρούμε ότι ο πρώτος όρος της (4.2.14) $\frac{n^2 v(0)V}{2} = \frac{N^2 v(0)}{2V}$ συμπίπτει με την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης που εξάγαμε στη προσέγγιση χαμηλότερης τάξης. Τώρα, όπως είναι φυσικό, που μελετήσαμε το σύστημα με μεγαλύτερη ακρίβεια εξάγαμε και άλλους όρους στη χαμιλτονιανή οι οποίοι περιγράφουν τις κβαντικές διακυμάνσεις γύρω από το ελάχιστο της ενέργειας που προσδιορίζει το συμπύκνωμα. Από τους όρους αυτούς παίρνουμε τη διόρθωση στην ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης αλλά και τις στοιχειώδεις διεγέρσεις όπως δείχνουμε στη συνέχεια.

Η χαμιλτονιανή (4.2.15) βλέπουμε ότι είναι μη διαγώνια ως προς τους τελεστές $\hat{a}_{\vec{k}}$ και $\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger$. Για να μπορέσουμε να τη διαγωνιοποιήσουμε κάνουμε ένα κανονικό μετασχηματισμό και εισάγουμε νέους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας. Ο μετασχηματισμός αυτός είναι γνωστός ως μετασχηματισμός Bogoliubov και ισούται με:

$$\hat{a}_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} b_{-\vec{k}}^\dagger \quad (4.2.16)$$

όπου οι νέοι τελεστές ικανοποιούν τις παρακάτω σχέσεις μετάθεσης:

$$\left[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger \right] = \delta_{\vec{k} \vec{k}'} \quad , \quad \left[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'} \right] = \left[b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}'}^\dagger \right] = 0 \quad (4.2.17)$$

Τους συντελεστές $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ τους θεωρούμε πραγματικούς αριθμούς και άρτιες συναρτήσεις του \vec{k} δηλαδή $u_{\vec{k}} = u_{-\vec{k}}$ και $v_{\vec{k}} = v_{-\vec{k}}$. Οι συντελεστές μέσω των σχέσεων μετάθεσης

(4.2.4) και (4.2.17) αποδεικνύεται ότι ικανοποιούν επιπλέον τη σχέση :

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (4.2.18)$$

Συνεπώς η χαμιλτονιανή (4.2.15) μέσω των (4.2.16),(4.2.17) και (4.2.18) γράφεται στη μορφή:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{Vn^2v(0)}{2} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] v_{\vec{k}}^2 + nv(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \right\} \\ &+ \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) + 2nv(\vec{k}) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \right\} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} \\ &+ \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \frac{1}{2} nv(\vec{k}) (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \right\} (\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}}) \end{aligned} \quad (4.2.19)$$

Για να μπορέσουμε να απλοποιήσουμε την έκφραση για τη χαμιλτονιανή αρκεί να παρατηρήσουμε ότι μπορεί οι συντελεστές να ικανοποιούν τη (4.2.18) έχουν όμως απροσδιόριστο πηλικό. Συνυπολογίζοντας και το γεγονός ότι θέλουμε η χαμιλτονιανή να είναι διαγώνια ως προς τους τελεστές $\hat{b}_{\vec{k}}$ και $\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger$ μπορούμε να επιβάλλουμε τη συνθήκη:

$$\left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \frac{1}{2} nv(\vec{k}) (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) = 0 \quad (4.2.20)$$

Συναρτήσεις που ικανοποιούν τους περιορισμούς των συντελεστών είναι οι υπερβολικές και συνεπώς μπορούμε να τους ταυτίσουμε με:

$$u_{\vec{k}} = \cosh(\theta_{\vec{k}}) \quad , \quad v_{\vec{k}} = \sinh(\theta_{\vec{k}}) \quad (4.2.21)$$

με $\theta_{\vec{k}} = \theta_{-\vec{k}}$. Με αντικατάσταση της (4.2.21) στη (4.2.20) έχουμε το περιορισμό:

$$\tanh(2\theta_{\vec{k}}) = -\frac{nv(\vec{k})}{\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k})} \quad (4.2.22)$$

Ορίζοντας τέλος τη ποσότητα:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}} \left[\varepsilon_{\vec{k}} + 2nv(\vec{k}) \right]} \quad (4.2.23)$$

και χρησιμοποιώντας τις ταυτότητες $\cosh(2a) = \cosh^2(a) + \sinh^2(a)$, $\sinh(2a) = 2 \cosh(a) \sinh(a)$

βρίσκουμε ότι οι συντελεστές υπακούουν τις σχέσεις:

$$\begin{aligned}
 u_{\vec{k}}^2 &= \frac{\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k})}{2E_{\vec{k}}} + \frac{1}{2} \\
 v_{\vec{k}}^2 &= \frac{\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k})}{2E_{\vec{k}}} - \frac{1}{2} \\
 u_{\vec{k}}v_{\vec{k}} &= -\frac{nv(\vec{k})}{2E_{\vec{k}}}
 \end{aligned} \tag{4.2.24}$$

Μέσω των σχέσεων (4.2.23) ,(4.2.24) η χαμιλτονιανή της (4.2.19) παίρνει τη τελική, διαγώνια μορφή της

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} \tag{4.2.25}$$

όπου ορίσαμε E_0 τη ποσότητα

$$E_0 = \frac{Vn^2v(0)}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ E_{\vec{k}} - \left[\varepsilon_{\vec{k}} + nv(\vec{k}) \right] \right\} \tag{4.2.26}$$

Έστω $|\Psi_0\rangle$ η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος. Για $T = 0$ θεωρούμε ότι όλα τα άτομα βρίσκονται στη κατάσταση με $\vec{k} = 0$, συνεπώς η δράση της χαμιλτονιανής στη κατάσταση αυτή δίνει:

$$\hat{H} |\Psi_0\rangle = \left\{ E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} \right\} |\Psi_0\rangle = E_0 |\Psi_0\rangle \tag{4.2.27}$$

άρα E_0 είναι η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης στην ανώτερης τάξης προσέγγιση.

Από τα παραπάνω παρατηρούμε ότι η θεμελιώδης κατάσταση της χαμιλτονιανής προσδιορίζεται απο τη σχέση:

$$\hat{b}_{\vec{k}} |\Psi_0\rangle = 0 \quad , \quad \vec{k} \neq 0 \tag{4.2.28}$$

Οι στοιχειώδεις διεγέρσεις του συστήματος αντιστοιχούν στις καταστάσεις $|\Psi_{exc}\rangle = \hat{b}_{\vec{k}} |\Psi_0\rangle$ με $k \neq 0$. Οι διεγέρσεις αυτές έχουν ενέργεια:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} |\Psi_{exc}\rangle &= \left\{ E_0 + \sum_{\lambda \neq 0} E_{\lambda} \hat{b}_{\lambda}^\dagger \hat{b}_{\lambda} \right\} \hat{b}_{\vec{k}} |\Psi_0\rangle \\
 &= E_0 |\Psi_{exc}\rangle + \sum_{\lambda \neq 0} E_{\lambda} \hat{b}_{\lambda}^\dagger \left(\left[\hat{b}_{\lambda}, \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \right] + \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\lambda} \right) |\Psi_0\rangle
 \end{aligned}$$

ή

$$\hat{H} |\Psi_{exc}\rangle = (E_0 + E_{\vec{k}}) |\Psi_{exc}\rangle \quad (4.2.29)$$

Ακόμα απο θεωρία πεδίου γνωρίζουμε ότι η ορμή του πεδιακού μας συστήματος στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης είναι:

$$\hat{P} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \vec{k} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} \quad (4.2.30)$$

Συνεπώς οι στοιχειώδεις διεγέρσεις έχουν ορμή:

$$\hat{P} |\Psi_{exc}\rangle = \vec{k} |\Psi_{exc}\rangle \quad (4.2.31)$$

με τη προϋπόθεση ότι $k \neq 0$.

Παρατηρούμε ότι οι διεγέρσεις που χαρακτηρίζονται απο τις καταστάσεις $|\Psi_{exc}\rangle$ έχουν ενέργεια και ορμή οπότε μπορούμε να τις θεωρήσουμε σαν σωματίδια τα οποία λέγονται "όιωνεί-σωμάτια" ή αλλιώς quasi-particles. Τα σωματία αυτά έχουν ενέργεια η οποία προσδιορίζεται απο τη σχέση διασποράς (4.2.23).

Συμπερασματικά ξεκινήσαμε από μια θεωρία που περιέγραφε ομογενές σύστημα από N αλληλεπιδρώντα μποζόνια με χαμιλτονιανή αυτή της σχέσης (4.2.3) και καταλήξαμε μέσω του κανονικού μετασχηματισμού στη χαμιλτονιανή της σχέσης (4.2.25) η οποία ουσιαστικά περιγράφει μη αλληλεπιδρώντα quasi-particles με σχέση διασποράς τη (4.2.23). Η μέθοδος αυτή την οποία ανέπτυξε ο Bogoliubov υπολογίζει, μέσω των αναγκαίων προσεγγίσεων, την διόρθωση στην ενέργεια των αλληλεπιδρώντων μποζονίων και προβλέπει την ύπαρξη των quasi-particles τα οποία χρησιμοποιούνται ευρέως στη σημερινή μελέτη του BEC .

4.3 Η Εξίσωση Gross–Pitaevskii

4.3.1 Γενικά χαρακτηριστικά

Όλη η προηγούμενη μελέτη αφορούσε ομογενή συστήματα. Το συμπύκνωμα Bose–Einstein δημιουργείται πειραματικά όταν τα αέρια είναι παγιδευμένα σε παγίδες οπτικές ή μαγνητικές [7,8] και συνεπώς εκεί δεν αποτελούν ομογενές σύστημα. Ακόμα τα μη ομογενή συστήματα εμφανίζουν πολλά και ενδιαφέροντα φαινόμενα λόγω της κβαντικής τους φύσης. Για όλους αυτούς τους λόγους γίνεται εμφανής η ανάγκη να περιγράψουμε με συστηματικό τρόπο και τα μη ομογενή συστήματα αλληλεπιδρώντων μποζονίων. Για να το κάνουμε αυτό πρέπει να γενικεύσουμε τη θεωρία της προηγούμενης παραγράφου διότι πλέον τα επίπεδα κύματα δεν αποτελούν τη βάση στην οποία μπορούμε να αναπτύξουμε τους πεδιακούς τελεστές. Κατά τα γνωστά το σύστημα μας στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης περιγράφεται από τη χαμιλτονιανή:

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') V_{\text{int}} \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \quad (4.3.1)$$

όπου V_{int} το δυναμικό αλληλεπίδρασης των μποζονίων και $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{ext}}$ η χαμιλτονιανή ενός σωματιδίου παρουσία εξωτερικού δυναμικού παγίδευσης.

Θεωρούμε ότι το αέριο είναι αραιό (dilute) αλλά και σε πολύ χαμηλή θερμοκρασία (ultra-cold) ώστε οι σκεδάσεις μεταξύ των ατόμων να χαρακτηρίζονται αποκλειστικά από το μήκος σκέδασης a και η αλληλεπίδραση στο χώρο των θέσεων να μπορεί να θεωρηθεί σημειακή. Έτσι με βάση αυτές τις προσεγγίσεις μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε όχι το πραγματικό δυναμικό της αλληλεπίδρασης αλλά όπως έχουμε πεί ένα ενεργό δυναμικό το οποίο να δίνει το ίδιο μήκος σκέδασης. Το δυναμικό αυτό στο χώρο των θέσεων είναι [2,9]:

$$V_{\text{int}}(\vec{r}, \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.3.2)$$

Οπότε η (4.3.1) μέσω της (4.3.2) απλουστεύεται και γίνεται:

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}) + \frac{g}{2} \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}) \quad (4.3.3)$$

Από τη κβαντική μηχανική γνωρίζουμε ότι για να βρούμε τις εξισώσεις κίνησης ενός τελεστή στην εικόνα Heisenberg αρκεί να βρούμε το μεταθέτη του με τη χαμιλτονιανή. Συνεπώς ισχύει:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] \quad (4.3.4)$$

Εκτελώντας τις πράξεις με παράλληλη χρήση των σχέσεων μετάθεσης $[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] =$

$\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ και $[\hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}')] = [\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}')] = 0$ τελικά βρίσκουμε [1,2,4,9]:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + g \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (4.3.5)$$

Στο σημείο αυτό εφαρμόζουμε τη προσέγγιση Bogoliubov. Δηλαδή γράφουμε το πεδιακό τελεστή σαν γραμμικό συνδυασμό των διανυσμάτων βάσης και αντικαθιστούμε $\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger \rightarrow \sqrt{N_0}$ με αποτέλεσμα να γραφεί όπως έχουμε δείξει σαν:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Psi_0(\vec{r}, t) + \delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (4.3.6)$$

Επειδή το αέριο όπως αναφέραμε βρίσκεται σε θερμοκρασία πολύ χαμηλότερη από τη κρίσιμη οι θερμικές διακυμάνσεις του πεδιακού τελεστή μπορούν να αγνοηθούν. Επίσης επειδή το αέριο είναι αρκετά αραιό ισχύει η σχέση $n|a|^3 \ll 1$ και οι κβαντικές διακυμάνσεις του πεδιακού τελεστή μπορούν και αυτές να αγνοηθούν. Τέλος το ότι εφαρμόσαμε τη προσέγγιση Bogoliubov και θεωρήσαμε ότι οι τελεστές $\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger$ είναι αριθμοί προϋποθέτει ότι ο αριθμός των ατόμων είναι αρκετά μεγάλος και ότι τα περισσότερα σωματίδια, αν όχι όλα, βρίσκονται στη θεμελιώδη τους κατάσταση. Για όλους αυτούς τους λόγους μπορούμε να αγνοήσουμε τον όρο $\delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ από το άθροισμα της (4.3.6) και να αντικαταστήσουμε το πεδιακό τελεστή $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ με το κλασικό πεδίο $\Psi_0(\vec{r}, t)$ το οποίο ισούται με την αναμενόμενη τιμή του τελεστή ανάμεσα σε καταστάσεις με διαφορετικό αριθμό σωματιδίων δηλαδή:

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \langle \hat{\Psi} \rangle = \langle N | \hat{\Psi} | N + 1 \rangle \quad (4.3.7)$$

Τελικά μέσω των παραπάνω συλλογισμών η σχέση (4.3.5) παίρνει τη τελική της μορφή η οποία είναι η γνωστή εξίσωση Gross–Pitaevskii

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} + g |\Psi_0(\vec{r}, t)|^2 \right) \Psi_0(\vec{r}, t) \quad (4.3.8)$$

για το πεδίο $\Psi_0(\vec{r}, t)$. Η εξίσωση αυτή προκύπτει να είναι μη γραμμική για το πεδίο $\Psi_0(\vec{r}, t)$ λόγω των αλληλεπιδράσεων και αποτελεί το θεωρητικό εργαλείο για την εξερεύνηση των στατικών και δυναμικών χαρακτηριστικών των μη ομογενών μπεζονικών αερίων σε χαμηλές θερμοκρασίες. Στη πλήρως συμπυκνωμένη κατάσταση όλα τα άτομα βρίσκονται στην ίδια κατάσταση $\varphi(\vec{r})$ οπότε η κυματοσυναρτήρηση των πολλών σωματιδίων είναι το γινόμενο των επιμέρους κυματοσυναρτήσεων ενός σωματιδίου. Δηλαδή:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \varphi(\vec{r}_i) \quad (4.3.9)$$

με τη κάθε κατάσταση ενός σωματιδίου κανονικοποιημένη στη μονάδα. Η χαμιλτονιανή του συστήματος είναι:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right] + g \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (4.3.10)$$

Συνεπώς η ενέργεια του συστήματος στη κατάσταση (4.3.9) δηλαδή η αναμενόμενη τιμή σε αυτή τη κατάσταση προκύπτει να είναι [1,2,4]:

$$E[\Psi_0] = \int d\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi_0|^2 + V(\vec{r}) |\Psi_0|^2 + \frac{1}{2} g |\Psi_0|^4 \right] \quad (4.3.11)$$

με τον ολικό αριθμό σωματιδίων $N = N_0 = \int d\vec{r} |\Psi_0|^2$ να παραμένει σταθερός. Η σταθερά g είναι θετική ή αρνητική ανάλογα με το αν έχουμε απωστικές ή ελκτικές δυνάμεις μεταξύ των ατόμων. Ο πρώτος όρος στην έκφραση (4.3.11) για την ενέργεια αντιστοιχεί στην κινητική ενέργεια του συμπυκνώματος, ο δεύτερος στην ενέργεια που αφορά το δυναμικό του ταλαντωτή και ο τρίτος αντιστοιχεί στην ενέργεια του μέσου πεδίου εξαιτίας της αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων[4]. Είπαμε ότι το κριτήριο για να είναι το αέριο αραιό ή ασθενικά αλληλεπιδρών είναι να ικανοποιείται η σχέση $n|a|^3 \ll 1$. Τι σημαίνει όμως ότι τα άτομα αλληλεπιδρούν ασθενικά μεταξύ τους, αφού υπάρχουν περιπτώσεις στις οποίες ακόμα και όταν $n|a|^3 \ll 1$ οι αλληλεπιδράσεις μπορεί να μην είναι ασθενείς. Για να το καταλάβουμε πρέπει να συγκρίνουμε την κινητική ενέργεια του συμπυκνώματος E_{kin} με την ενέργεια αλληλεπίδρασης E_{int} . Αποδεικνύεται ότι $E_{kin} \propto N\hbar\omega_{ho}$ και $E_{int} \propto \frac{N^2|a|}{a_{ho}^3}$ με $a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{1/2}$. Συνεπώς το πηλίκο τους είναι ανάλογο με :

$$\frac{E_{int}}{E_{kin}} \propto \frac{N|a|}{a_{ho}} \quad (4.3.12)$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι η ποσότητα η οποία δηλώνει τη σημασία της ενέργειας αλληλεπίδρασης σε σχέση με τη κινητική είναι αυτή της σχέσης (4.3.12) και μπορεί να είναι πολύ μεγαλύτερη της μονάδας ακόμα και αν $n|a|^3 \ll 1$ με αποτέλεσμα πολλά αραιά αέρια να μην θεωρούνται ιδανικά. Αν ελαχιστοποιήσουμε τη ποσότητα $E - \mu N$ δηλαδή κάνουμε τη μεταβολή:

$$\frac{\delta(E - \mu N)}{\delta\Psi_0^*} = 0 \quad (4.3.13)$$

θα πάρουμε την χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Gross–Pitaevskii η οποία είναι:

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \Psi_0(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi_0(\vec{r}) + g |\Psi_0(\vec{r})|^2 \Psi_0(\vec{r}) = \mu \Psi_0(\vec{r}) \quad (4.3.14)$$

Όπως η εξίσωση Schroedinger έτσι και η εξίσωση Gross–Pitaevskii πρέπει να συνοδεύεται από κάποια εξίσωση συνέχειας. Πράγματι, αν πολλαπλασιάσουμε κατά μέλη την (4.3.8) με

$\Psi_0^*(\vec{r})$ παίρνουμε

$$i\hbar\Psi_0^*\frac{\partial\Psi_0}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_0^*(\vec{r})\nabla^2\Psi_0(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})|\Psi_0(\vec{r})|^2 + g|\Psi_0(\vec{r})|^4$$

την οποία αφαιρώντας την από τη συζυγή της και κάνοντας τις πράξεις έχουμε τελικά την εξίσωση συνέχειας:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (4.3.15)$$

με $n = |\Psi_0|^2$ τη πυκνότητα των ατόμων και $\vec{J} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi_0^*\vec{\nabla}\Psi_0 - \Psi_0\vec{\nabla}\Psi_0^*)$.

Στο δεύτερο κεφάλαιο τη παράμετρο τάξης $\Psi_0(\vec{r}, t)$ την ορίσαμε σαν το γινόμενο του μέτρου της επί μια φάση

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = |\Psi_0(\vec{r}, t)| e^{iS(\vec{r}, t)}$$

ή καλύτερα

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \sqrt{n(\vec{r}, t)} e^{iS(\vec{r}, t)} \quad (4.3.16)$$

Θα εξάγουμε στο σημείο αυτό ένα σετ εξισώσεων για τη πυκνότητα και για τη φάση οι οποίες είναι ισοδύναμες της εξίσωσης Gross–Pitaevskii . Ξεκινώντας από την εξίσωση για το \vec{J} και αντικαθιστώντας τη παράμετρο τάξης από τη σχέση (4.3.15) βγάζουμε τη σχέση

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} n \vec{\nabla} S \quad (4.3.17)$$

Συνεπώς η εξίσωση συνέχειας μπορεί να πάρει την ακόλουθη μορφή:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{v}_s n) = 0 \quad (4.3.18)$$

όπου $\vec{v}_s(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} S$ η ταχύτητα ροής του συμπυκνώματος.

Αντικαθιστώντας τη (4.3.15) στη (4.3.8) και εκτελώντας τις πράξεις τελικά εξάγουμε τη σχέση:

$$\hbar \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} m v_s^2 + V_{ext} + gn - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} = 0 \quad (4.3.19)$$

Οι σχέσεις (4.3.17) και (4.3.18) αποτελούν κλειστό σύστημα εξισώσεων ισοδύναμων με τη χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Gross–Pitaevskii .

4.3.2 Θεμελιώδης κατάσταση

Αναζητάμε τη θεμελιώδη κατάσταση N αλληλεπιδρώντων μποζονίων παρουσία δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή. Αν τα άτομα δεν αλληλεπιδρούσαν τότε $g = 0$ και η (4.3.8) θα γινόταν μια απλή εξίσωση Schrodinger για κάθε ένα άτομο. Στη περίπτωση αυτή η θεμελιώδης κατάσταση αποκτάται όταν όλα τα άτομα πάνε στη χαμηλότερη ενεργειακά κατάσταση και άρα η κυματοσυνάρτηση πολλών σωματιδίων είναι:

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \varphi_0(\vec{r}_i) \quad (4.3.20)$$

με $\varphi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-m/2\hbar(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)}$ και $\omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$ ο γεωμετρικός μέσος των συχνοτήτων του ταλαντωτή. Η κυματοσυνάρτηση τότε που περιγράφει το συμπύκνωμα είναι:

$$\Psi_0 = \sqrt{N} \varphi_0(\vec{r}) \quad (4.3.21)$$

η οποία όπως βλέπουμε εξαρτάται από τον αριθμό των ατόμων.

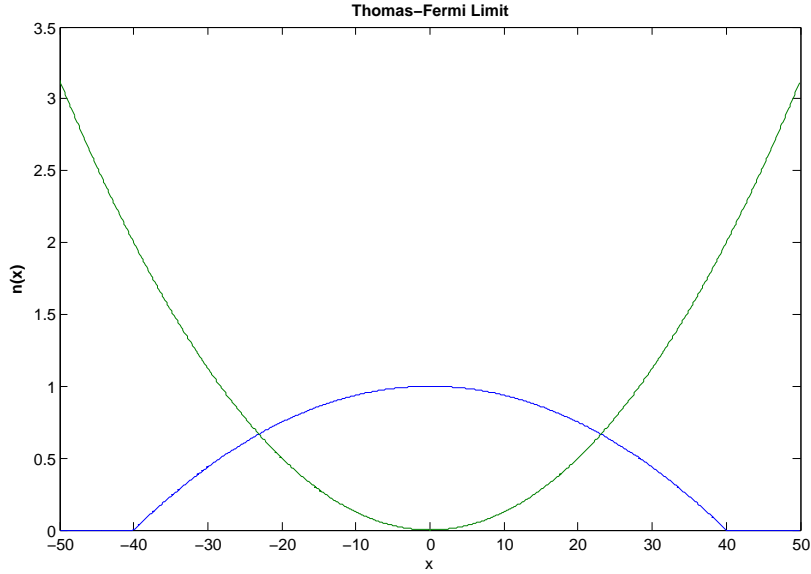
Η εισαγωγή των αλληλεπιδράσεων αλλάζει τη μορφή της πυκνότητας των ατόμων στη συμπυκνωμένη φάση ριζικά ιδίως όταν η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι πολύ μεγαλύτερη της κινητικής, δηλαδή όταν $\frac{N|a|}{a_{ho}} \gg 1$.

Θεωρούμε τη περίπτωση που $g > 0$ ώστε να έχουμε απωστικές αλληλεπιδράσεις. Αυτό που παρατηρούμε είναι ότι καθώς η τιμή της παραμέτρου $\frac{N|a|}{a_{ho}}$ μεγαλώνει στο κέντρο της γκαουσιανής ή αλλιώς το κέντρο της πυκνότητας χαμηλώνει και η ακτίνα του συμπυκνώματος μεγαλώνει. Το μεγαλύτερο ενδιαφέρον αλλά και η μεγαλύτερη απόκλιση από τη γκαουσιανή υπάρχει στη περίπτωση που $\frac{N|a|}{a_{ho}} \gg 1$, περίπτωση η οποία έχει επιτευχθεί πειραματικά στο εργαστήριο. Τώρα τα άτομα πιέζονται προς τα έξω με αποτέλεσμα η κατανομή της πυκνότητας να τείνει να γίνει επίπεδη και ακτίνα να μεγαλώσει. Για να μπορέσουμε να εξάγουμε τη μορφή της πυκνότητας των ατόμων αρχικά αδιαστατοποιούμε την εξίσωση (4.3.14) χρησιμοποιώντας τα a_{ho} , a_{ho}^{-3} και $\hbar\omega_{ho}$ ως μονάδες μέτρησης του μήκους, της πυκνότητας και της ενέργειας αντίστοιχα. Έτσι η (4.3.14) γίνεται:

$$\left[-\tilde{\nabla}^2 + \tilde{r}^2 + 8\pi \frac{N|a|}{a_{ho}} \tilde{\Psi}_0^2(\tilde{r}) \right] \tilde{\Psi}_0(\tilde{r}) = 2\mu \tilde{\Psi}_0(\tilde{r}) \quad (4.3.22)$$

και άρα στο όριο που $\frac{N|a|}{a_{ho}} \gg 1$ φαίνεται πλέον ξεκάθαρα ότι μπορούμε απλά να αγνοήσουμε τον όρο της κινητικής ενέργειας. Συνεπώς με αυτή τη σκέψη η (4.3.14) γίνεται:

$$[V_{ext}(\vec{r}) + g\Psi_0^2(r)] \Psi_0(r) = \mu\Psi_0(r)$$



Σχήμα 4.1: Πυκνότητα $n(x) = |\Psi_0|^2$ συμπυκνώματος στο όριο Thomas–Fermi σε μία διάσταση.

από την οποία προκύπτει η παράμετρος τάξης να είναι:

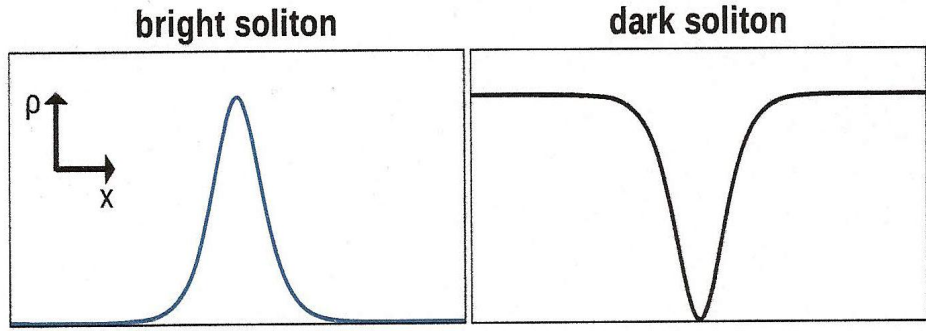
$$\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}(\vec{r})}{g}} \quad (4.3.23)$$

Τό όριο αυτό, στο οποίο αγνοήσαμε τον όρο της κινητικής ενέργειας, καλείται όριο Thomas–Fermi και ισχύει στη περίπτωση που οι ατομικές αλληλεπιδράσεις είναι πολύ ισχυρές ώστε ο όρος της κινητικής ενέργειας να είναι πρακτικά αμελητέος. Η πυκνότητα στο όριο αυτό έχει τη μορφή ανεστραμμένης παραβολής όπως φαίνεται στο γράφημα (4.1). Η πράσινη παραβολή αντιστοιχεί στο δυναμικό παγίδευσης.

Η τιμή της πυκνότητας στο κέντρο του δυναμικού παγίδευσης δηλαδή για $\vec{r} = 0$ και στο όριο που μελετάμε είναι $n_{TF}(0) = |\Psi_0(r)|^2 = \frac{\mu}{g}$ ενώ αυτή για το μη αλληλεπιδρόν προκύπτει να είναι πολύ μεγαλύτερη και ίση με [4] $n_{ho}(0) = |\Psi_0(r)|^2 = \frac{N}{\pi^{3/2} a_{ho}^3}$

4.3.3 Σολιτόνια

Εκτός από τη θεμελιώδη του κατάσταση το συμπύκνωμα εμφανίζει και διεγερμένες καταστάσεις με τις πιο θεμελιώδεις να είναι τα λεγόμενα σολιτονικά κύματα ύλης ή σολιτόνια. Τα σολιτόνια είναι κυματοπακέτα ύλης τα οποία διαδίδονται χωρίς παραμόρφωση διατηρώντας το σχήμα και τις ιδιότητες τους αναλλοίωτες. Τα σολιτόνια αποτέλεσαν αρχικά λύσεις εξισώσεων στη μη γραμμική οπτική, περιοχή από την οποία προήλθε το όνομα τους. Τα κύρια χαρακτηριστικά τους είναι η σταθερότητα που παρουσιάζουν καθώς και το γεγονός



Σχήμα 4.2: Πυκνότητες $\rho(x)$ για φωτεινό και σκοτεινό σολιτόνιο.

ότι μετά από σκεδάσεις συνεχίζουν να κινούνται χωρίς παραμόρφωση. Λόγω της τελευταίας ιδιότητας μπορούμε να πούμε ότι τα σολιτόνια συμπεριφέρονται σαν σωμάτια. Μηχανισμός δημιουργίας των σολιτονίων είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ φαινομένων διασποράς και μη γραμμικότητας. Από τη μια η διασπορά που παρουσιάζεται τείνει να απλώσει το σολιτόνιο και από την άλλη η μη γραμμικότητα που το σταθεροποιεί. Υπάρχουν δύο τύποι σολιτονίων: Τα σκοτεινά (dark solitons) τα οποία υπάρχουν για απωστικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων και τα φωτεινά (bright solitons) τα οποία δημιουργούνται όταν τα άτομα έλκονται. Στο σχήμα (4.2) φαίνονται οι μορφές των δύο σολιτονίων.

Θα ξεκινήσουμε τη μελέτη των σκοτεινών σολιτονίων από τη μονοδιάστατη έκφραση της εξίσωσης Gross–Pitaevskii. Είναι προφανές ότι στην περίπτωση ενός αερίου παγιδευμένου από δυναμικό τρισδιάστατου αρμονικού ταλαντωτή, μέσω των συχνοτήτων του ω_i με $i = x, y, z$ μπορούμε να καθορίσουμε το σχήμα του συμπυκνώματος. Συγκεκριμένα θεωρώντας ότι $\omega_x \ll \omega_y = \omega_z = \omega_\perp$ καταφέρνουμε το αέριο είναι πολύ ισχυρά παγιδευμένο στις κάθετες διευθύνσεις με αποτέλεσμα οι διεγερμένες καταστάσεις που τους αντιστοιχούν να μην είναι ενεργειακά προσβάσιμες και άρα να χαρακτηρίζονται από γκαουσιανές κυματοσυναρτήσεις. Έτσι θεωρώντας ότι $\Psi_0(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t) = \Phi(r, t)\psi(x, t)$, αντικαθιστώντας στη σχέση (4.3.8) και εκτελώντας τις ολοκληρώσεις ως προς τη $\Phi(r, t)$ καταλήγουμε στη παρακάτω μονοδιάστατη έκφραση της εξίσωσης:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + g^{1D} |\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) \quad (4.3.24)$$

όπου $g^{1D} = \frac{g}{2\pi a_\perp^2} = 2a\hbar\omega_\perp$ και $a_\perp = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp}}$. Η τελευταία μπορεί να εκφραστεί στη παρακάτω αδιάστατη μορφή:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \Omega^2 x^2 + |\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t) \quad (4.3.25)$$

όπου η πυκνότητα, το μήκος και ο χρόνος έχουν τις μονάδες 2α , α_{\perp} και ω_{\perp}^{-1} αντίστοιχα. Σε πρώτη προσέγγιση της ανάλυσης μας θεωρούμε ότι $\Omega \ll 1$ και άρα το δυναμικό μπορεί αρχικά να θεωρηθεί αμελητέο. Σε αυτή τη περίπτωση η σχέση (4.3.25) είναι πλήρως ολοκληρώσιμη και παίρνει τη μορφή:

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + |\psi(x,t)|^2 \right] \psi(x,t) \quad (4.3.26)$$

Προφανώς η ενέργεια σε αδιάστατη μορφή γίνεται πλέον ίση με:

$$E = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\left| \frac{\partial\psi}{\partial x} \right|^2 + |\psi|^4 \right) dx \quad (4.3.27)$$

Η πιο απλή λύση της εξίσωσης (4.3.26) είναι ένα επίπεδο κύμα το οποίο χαρακτηρίζεται από κυματάριθμό k και συχνότητα ω , δηλαδή

$$\psi(x,t) = \sqrt{n_0} \exp[i(kx - \omega t + \theta_0)] \quad (4.3.28)$$

με $n_0 = \mu$ όπως μπορούμε να εξάγουμε από τη σχέση (4.3.23) και θ_0 αυθαίρετη σταθερά φάσης. Εκτός όμως από αυτή τη λύση η παραπάνω εξίσωση δέχεται και λύσεις της μορφής των σκοτεινών σολιτονίων [17] τα οποία όπως είπαμε αποτελούν τις στοιχειώδεις διεγέρσεις του απλού κύματος. Η πιο γενική μορφή ενός σκοτεινού σολιτονίου σε κινούμενο υπόβαθρο ($k \neq 0$) είναι η ακόλουθη:

$$\psi(x,t) = \sqrt{n_0}(B \tanh \zeta + iA) \exp[i(kx - \omega t + \theta_0)] \quad (4.3.29)$$

όπου $\zeta = \sqrt{n_0}B(x - x_0(t))$ με $x_0(t) = vt + x_0$ το κέντρο του σολιτονίου, x_0 η αρχική του θέση, $v = A\sqrt{n_0} + k$ η σχετική ταχύτητα μεταξύ του υποβάθρου και του σολιτονίου και $\omega = \frac{k^2}{2} + n_0$ η σχέση διασποράς του. Οι παράμετροι A, B ικανοποιούν τη σχέση $A^2 + B^2 = 1$ και συνεπώς μπορούμε να τις ορίσουμε ως $A = \sin \varphi$ και $B = \cos \varphi$. Η γωνία φ ονομάζεται γωνία φάσης σολιτονίου (soliton phase angle) με $|\varphi| < \frac{\pi}{2}$.

Στη συνέχεια θεωρούμε το υπόβαθρο σε ακινησία, δηλαδή $k = 0$ και $\omega = \mu$ από τη σχέση διασποράς. Στη περίπτωση αυτή το σολιτόνιο έχει πλάτος $\sqrt{n_0} \cos \varphi$ και ταχύτητα $\sqrt{n_0} \sin \varphi$. Για $\varphi = 0$ το σολιτόνιο ονομάζεται μαύρο και παίρνει τη γνωστή μορφή:

$$\psi(x,t) = \sqrt{n_0} \tanh(\sqrt{n_0}x) e^{-i\mu t} \quad (4.3.30)$$

το οποίο προφανώς έχει ταχύτητα μηδέν. Όπως παρατηρούμε από τη τελευταία σχέση το σκοτεινό σολιτόνιο χαρακτηρίζεται από δύο ανεξάρτητες παραμέτρους, μία τη πυκνότητα n_0

για το υπόβαθρο και μία τη γωνία φ η οποία όπως είδαμε χαρακτηρίζει τη σκοτεινότητα του σολιτονίου. Στη περίπτωση του συμπυκνώματος το οποίο βρίσκεται παγιδευμένο σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή το υπόβαθρο θα χαρακτηρίζει τη θεμελιώδη κατάσταση του συμπυκνώματος και θα μπορεί να προσεγγιστεί από το όριο Thomas–Fermi. Έτσι στη περίπτωση της μονοδιάστατης εξίσωσης Gross–Pitaevskii η συνολική κυματοσυνάρτηση η οποία περιγράφει το υπόβαθρο αλλά και το σολιτόνιο έχει τη μορφή $\psi(x, t) = \Phi(x)\psi_{ds}(x, t)e^{-i\mu t}$ όπου η $\Phi(x)$ περιγράφει το υπόβαθρο Thomas–Fermi και η $\psi_{ds}(x, t)$ το σολιτόνιο της σχέσης (4.3.29) το οποίο ικανοποιεί την σχέση (4.3.26). Τέτοιου είδους λύσεις εξετάζουμε στο επόμενο κεφάλαιο, στη περίπτωση του σπινωριακού συμπυκνώματος.

Κεφάλαιο 5

Θεωρία Σπινοριακού Συμπυκνώματος

Το συμπύκνωμα δημιουργήθηκε πειραματικά μόλις το 1995 σε αραιά αέρια εξαιτίας της τεχνολογικής προόδου η οποία είχε ως αποτέλεσμα τη δημιουργία μαγνητικών παγίδων καθώς και τεχνικών ψύξης. Η χρήση όμως των συμβατικών μαγνητικών παγίδων είχε ως αποτέλεσμα τη μη ανάδειξη φαινομένων που είχαν σχέση με το σπιν των ατόμων και έτσι τα άτομα συμπεριφέρονταν σαν να μην είχαν σπίν και η παράμετρος τάξης εμφανίζονταν σαν βαθμωτό μέγεθος. Το 1998 όμως το γκρουπ του MIT κατάφερε τη παγίδευση των ατόμων με οπτικές παγίδες οι οποίες άφηναν το σπίν των ατόμων ελεύθερο. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα την ανάδειξη νέων φαινομένων που είχαν σχέση με το σπίν της υπέρλεπτης υφής των ατόμων καθώς και με τις σπίν αλληλεπιδράσεις αυτών. Στο κεφάλαιο αυτό αναλύουμε τις ιδιότητες του σπινοριακού συμπυκνώματος Bose–Einstein με σπίν 1 και λύνουμε αριθμητικά τις τρεις μη γραμμικές διαφορικές εξισώσεις των παραμέτρων τάξης.

5.1 Μικροσκοπική θεωρία

Αρχικά θεωρούμε ότι το αέριο είναι σε πολύ χαμηλή θερμοκρασία και αραιό ώστε να θεωρούμε μόνο αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο ατόμων οι οποίες θα χαρακτηρίζονται από το μήκος σκέδασης a . Όταν δύο όμοια άτομα πλησιάζουν μεταξύ τους με σπίν f το καθένα τότε συγκρούονται και αλληλεπιδρούν. Το συνολικό σπίν των ατόμων είναι $\vec{F} = \vec{f}_1 + \vec{f}_2$ με $f_1 = f_2 = 1$ και $F = 2f, 2f - 1, \dots, 0$. Λόγω όμως της συμμετρίας που επιβάλλουν τα μποζόνια πρέπει το ολικό σπίν να είναι άρτιος αριθμός όταν η ολική χωρική κυματοσυνάρτηση που τα περιγράφει είναι συμμετρική. Συνεπώς αντιλαμβανόμαστε ότι τελικά $F = 2, 0$ και άρα οι ατομικές αλληλεπιδράσεις χαρακτηρίζονται, όπως θα διαπιστώσουμε, μόνο από δύο μήκη σκέδασης $a_{F=2}$ και $a_{F=0}$ ένα για κάθε τιμή του ολικού σπίν.

Προβάλλοντας το χώρο καταστάσεων των δύο σωματιδίων $\sum_{m_f} |f=1, m_f\rangle \otimes \sum_{m_f} |f=1, m_f\rangle$ στο χώρο καταστάσεων του ολικού τους σπίν $\sum_{m_F} |F=0, m_F\rangle \otimes \sum_{m_F} |F=2, m_F\rangle$ προκύπτει το δυναμικό αλληλεπίδρασης των ατόμων να είναι:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \sum_{F=0}^{2f} g_F \vec{P}_F \quad (5.1.1)$$

όπου

$$g_F = \frac{4\pi\hbar^2 a_F}{m} \quad (5.1.2)$$

είναι η σταθερά αλληλεπίδρασης για κάθε τιμή του ολικού σπίν. Ο προβολικός τελεστής \vec{P}_F ισούται με

$$\vec{P}_F = \sum_{m_F=-F}^{+F} |F, m_F\rangle \langle F, m_F| \quad (5.1.3)$$

για κάθε τιμή του ολικού σπίν και όλοι μαζί ικανοποιούν τη παρακάτω σχέση

$$1 = \sum_{F=0}^{2f} \vec{P}_F = \vec{P}_0 + \vec{P}_2 \quad (5.1.4)$$

αφού το ολικό σπίν παίρνει τις τιμές $F=0, 2$. Τον όρο αλληλεπίδρασης μεταξύ των σπιν μπορούμε να τον γράψουμε ως εξής:

$$\vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2 = \frac{\vec{F}^2 - \vec{f}_1^2 - \vec{f}_2^2}{2} = \frac{F(F+1) - 2f(f+1)}{2} \quad (5.1.5)$$

Με τη βοήθεια του ταυτοτικού τελεστή έχουμε:

$$\vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2 = (\vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2) \cdot 1 = \sum_F \vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2 \vec{P}_F = \sum_F \frac{F(F+1) - 2f(f+1)}{2} \vec{P}_F \quad (5.1.6)$$

η οποία με αντικατάσταση των τιμών για το ολικό σπίν γίνεται τελικά:

$$\vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2 = \vec{P}_2 - 2\vec{P}_0 \quad (5.1.7)$$

Συνεπώς οι ατομικές αλληλεπιδράσεις:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \sum_F g_F \vec{P}_F = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) (g_0 \vec{P}_0 + g_2 \vec{P}_2) \quad (5.1.8)$$

μέσω των (5.1.4) και (5.1.7) γίνονται:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left(c_0 (\vec{P}_0 + \vec{P}_2) + c_2 (\vec{P}_2 - 2\vec{P}_0) \right)$$

ή στη τελική τους μορφή:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left(c_0 + c_2 \vec{f}_1 \cdot \vec{f}_2 \right) \quad (5.1.9)$$

με $c_0 = \frac{g_0 + 2g_2}{3}$ και $c_2 = \frac{g_2 - g_0}{3}$ σταθερές που χαρακτηρίζουν τις αλληλεπιδράσεις.

Άρα η χαμιλτονιανή που χαρακτηρίζει το σύστημα μας το οποίο αποτελείται από σπιν 1 μποζόνια είναι:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) + \sum_{i<j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (5.1.10)$$

ή μέσω της (5.1.9):

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right] + \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \left(c_0 + c_2 \vec{f}_i \cdot \vec{f}_j \right) \quad (5.1.11)$$

όπου $U(\vec{r}_i)$ το εξωτερικό δυναμικό. Στη χαμιλτονιανή ο όρος αλληλεπίδρασης των σπιν προκύπτει να είναι ουσιαστικά το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ των σπιν δύο ατόμων ο οποίος προφανώς είναι αναλλοίωτος κάτω από στροφές στο χώρο αυτό. Αυτή η συμμετρία έχει ως αποτέλεσμα η παράμετρος τάξης του συμπυκνώματος να είναι διανυσματική και όχι βαθμωτή όπως στο απλό συμπύκνωμα του προηγούμενου κεφαλαίου που είχαμε τους σπινωτικούς βαθμούς ελευθερίας “παγωμένους”. Τα σπινωτικά συμπυκνώματα χωρίζονται σε δύο κατηγορίες ανάλογα με το πρόσημο της σταθεράς c_2 . Πράγματι, αν $c_2 < 0$ τότε η ελαχιστοποίηση της χαμιλτονιανής επιβάλλει τα σπιν των ατόμων να είναι στην ίδια κατεύθυνση. Τότε λέμε ότι το συμπύκνωμα είναι σιδηρομαγνητικό. Αν όμως $c_2 > 0$ αντιλαμβάνομαστε ότι πρέπει τα σπιν να είναι αντιπαράλληλα και το συμπύκνωμα καλείται αντισιδηρομαγνητικό.

5.2 Πεπλεγμένες εξισώσεις Gross–Pitaevskii

Η χρησιμότερη μορφή της χαμιλτονιανής είναι στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης και όχι της μορφής (5.1.11). Συνεπώς, η πιο γενική χαμιλτονιανή που μπορούμε να γράψουμε συναρτήσει των τριών πεδριακών τελεστών $(\hat{\Psi}_1, \hat{\Psi}_0, \hat{\Psi}_{-1})$ για σπίν 1 συμπύκνωμα είναι:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{r} \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \delta_{ij} + U_{ij}(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}_j(\vec{r}) \\ & + \frac{g_{ij,kl}}{2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_j^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_k(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_l(\vec{r}_1) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

όπου οι δείκτες i, j, k, l τρέχουν όλες τις τιμές των καταστάσεων $i, j, k, l = 1, 0, -1$ και η επανάληψη αυτών υπονοεί άθροιση. Οι συντελεστές $g_{ij,kl}$ αποτελούν τις σταθερές αλληλεπίδρασης για τις συγκρούσεις $\{k, l\} \rightarrow \{i, j\}$ και ο αριθμός τους είναι 81. Ο μεγάλος αυτός αριθμός των συντελεστών μειώνεται σημαντικά λόγω του ότι στη περίπτωση που μελετάμε οι συγκρούσεις είναι συμμετρικές στην εναλλαγή των ατόμων ($g_{ij,kl} = g_{ji,kl}$) και στη χρονική αντιστροφή ($g_{ij,kl} = g_{kl,ij}$). Τέλος εξαιτίας και της συμμετρίας κάτω από στροφές στο χώρο των σπιν, οι ανεξάρτητες παράμετροι καταλήγουν να είναι δύο και να αντιστοιχούν στα μήκη σκέδασης a_2 και a_0 . Συνεπώς η τελική μορφή της χαμιλτονιανής για σύστημα ατόμων με σπιν 1 στο φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης είναι:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{r} \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}_i(\vec{r}) \\ & + \frac{c_0}{2} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_j^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}_j(\vec{r}) \hat{\Psi}_i(\vec{r}) \\ & \frac{c_2}{2} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_i^\dagger(\vec{r}) (f_a)_{ij} \hat{\Psi}_j(\vec{r}) \hat{\Psi}_k^\dagger(\vec{r}) (f_a)_{kl} \hat{\Psi}_l(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

όπου $i, j, k, l = 1, 0, -1$ και $f_{a=x,y,z}$ οι πίνακες για σπίν-1 με :

$$f_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad f_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad f_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.2.3)$$

Η δυναμική του συστήματος κρύβεται στις πεπλεγμένες εξισώσεις Gross–Pitaevskii τις οποίες ικανοποιούν οι τρεις καταστάσεις σπίν. Για να τις βρούμε απλώς θα χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση κίνησης Heisenberg για το κάθε πεδιακό τελεστή. Συγκεκριμένα έχουμε:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_a(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{\Psi}_a(\vec{r}, t), \hat{H}] \quad (5.2.4)$$

με $a = 1, 0, -1$. Με αντικατάσταση της (5.2.2) στην (5.2.4) τελικά θα βρούμε τις τρεις εξισώσεις για τους πεδιακούς τελεστές οι οποίες σε συμπυκνωμένη μορφή είναι:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}_a(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r}) \right) \hat{\Psi}_a + c_0 \hat{\Psi}_i^\dagger \hat{\Psi}_i \hat{\Psi}_a + c_2 \hat{\Psi}_j^\dagger \vec{f}_{ak} \cdot \vec{f}_{jl} \hat{\Psi}_l \hat{\Psi}_k \quad (5.2.5)$$

με $a = 1, 0, -1$ και όπου υπάρχει επανάληψη δεικτών να εννοείται άθροιση.

Στο όριο που το αέριο θεωρείται αραιό και σε χαμηλή θερμοκρασία όλα τα άτομα βρίσκονται στη θεμελιώδη τους κατάσταση οπότε μπορούμε να αγνοήσουμε τις συνεισφορές από τις διεγερμένες καταστάσεις (λόγω των κβαντικών και θερμικών διακυμάνσεων) και άρα να εφαρμόσουμε τη προσέγγιση Bogoliubov δηλαδή

$$\left\langle \left(\hat{\Psi}_1, \hat{\Psi}_0, \hat{\Psi}_{-1} \right)^T \right\rangle = (\psi_1, \psi_0, \psi_{-1})^T \quad (5.2.6)$$

με αποτέλεσμα οι τρεις εξισώσεις για τη διανυσματική παράμετρο τάξης να γίνουν:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_1(\vec{r}, t)}{\partial t} &= L\psi_1 + c_0 n_{tot} \psi_1 + c_2 (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 - |\psi_{-1}|^2) \psi_1 + c_2 \psi_0^2 \psi_{-1}^* \\ i\hbar \frac{\partial \psi_0(\vec{r}, t)}{\partial t} &= L\psi_0 + c_0 n_{tot} \psi_0 + c_2 (|\psi_1|^2 + |\psi_{-1}|^2) \psi_0 + 2c_2 \psi_0^* \psi_1 \psi_{-1} \\ i\hbar \frac{\partial \psi_{-1}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= L\psi_{-1} + c_0 n_{tot} \psi_{-1} + c_2 (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2 - |\psi_1|^2) \psi_{-1} + c_2 \psi_0^2 \psi_1^* \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

με $L = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\vec{r})$ και $n_{tot} = |\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_{-1}|^2$ η ολική πυκνότητα των ατόμων.

5.2.1 Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Gross–Pitaevskii

Στόχος μας είναι να επιλύσουμε το σύστημα των τριών πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων. Η αναλυτική τους επίλυση είναι δύσκολη εξαιτίας της μη γραμμικότητας τους η οποία μπλέκει επιπλέον τις διάφορες συνιστώσες. Συνεπώς για να τις λύσουμε καταφεύγουμε στις διάφορες αριθμητικές μεθόδους μέσω προγραμματιστικών πακέτων. Παρόλο που η τεχνολογία έχει προοδεύσει η επίλυση των εξισώσεων σε τρεις διαστάσεις παραμένει ένα αρκετά δύσκολο σημείο. Συνήθως θεωρούμε κάποιου είδους συμμετρία στο πρόβλημα μας και έτσι μειώνουμε τον αριθμό των διαστάσεων στις δύο ή ακόμα και σε μία. Η διάσταση του συμπυκνώματος εξαρτάται κυρίως από το δυναμικό παγίδευσης, έτσι στη παρούσα εργασία θεωρούμε ότι το δυναμικό είναι τύπου αρμονικού ταλαντωτή με ιδιότητα $\omega_x \ll \omega_\perp$ όπου $\omega_y = \omega_z = \omega_\perp$. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το συμπύκνωμα να είναι ισχυρά παγιδευμένο στη y και στη z διάσταση με αποτέλεσμα να θεωρείται μονοδιάστατο. Η κυματοσυνάρτηση τότε γράφεται $\psi_i(\vec{r}, t) = f_i(r, t)\psi_i(x, t)$ με $i = 1, 0, -1$. Τότε η εγχάρσιες συνιστώσες $f_i(r, t)$ περιγράφονται από τη

θεμελιώδη κατάσταση του αρμονικού ταλαντωτή οι οποίες ολοκληρώνονται με αποτέλεσμα οι σχέσεις (5.2.7) να γίνουν:

$$\begin{aligned}
ih \frac{\partial \psi_1(x,t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_1 + c_0^{1D} (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_{-1}|^2) \psi_1 + c_2^{1D} (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 - |\psi_{-1}|^2) \psi_1 + c_2^{1D} \psi_0^2 \psi_{-1}^* \\
ih \frac{\partial \psi_0(x,t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_0 + c_0^{1D} (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_{-1}|^2) \psi_0 + c_2^{1D} (|\psi_1|^2 + |\psi_{-1}|^2) \psi_0 + 2c_2^{1D} \psi_0^* \psi_{-1} \psi_1 \\
ih \frac{\partial \psi_{-1}(x,t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_{-1} + c_0^{1D} (|\psi_1|^2 + |\psi_0|^2 + |\psi_{-1}|^2) \psi_{-1} + c_2^{1D} (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2 - |\psi_1|^2) \psi_{-1} + c_2^{1D} \psi_0^2 \psi_1^*
\end{aligned}
\tag{5.2.8}$$

με $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega_x^2$. Οι συντελεστές της μη γραμμικότητας σε μία διάσταση είναι $c_0^{1D} = \frac{c_0}{2\pi a_\perp^2}$ και $c_2^{1D} = \frac{c_2}{2\pi a_\perp^2}$ με $a_\perp = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp}}$ το εγκάρσιο μήκος του αρμονικού ταλαντωτή που καθορίζει το πλάτος της εγκάρσιας θεμελιώδους κατάστασης.

Η επίλυση των εξισώσεων (5.2.8) έγινε με τη βοήθεια του προγραμματιστικού πακέτου Matlab. Συγκεκριμένα με αφετηρία τη μέθοδο pseudospectral [19], η οποία χρησιμοποιείται ευρέως στην επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης Gross–Pitaevskii με βαθμωτή κυματοσυνάρτηση, καταφέραμε και αναπτύξαμε πρόγραμμα ταυτόχρονης επίλυσης των εξισώσεων (5.2.9). Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι η χρησιμοποίηση ενός διακριτού μετασχηματισμού Fourier για τον υπολογισμό της χωρικής παραγώγου και εν συνεχεία ο υπολογισμός της χρονικής μέσω της 4ης τάξης Runge–Kutta μεθόδου. Για να μπορέσουμε να τις λύσουμε τις εξισώσεις αρχικά τις αδιαστατοποιούμε.

Μετρώντας το χρόνο, το μήκος και τη πυκνότητα σε μονάδες $\frac{\hbar}{c_0^{1D} n_0}$, $\frac{\hbar}{\sqrt{m c_0^{1D} n_0}}$ και n_0 αντίστοιχα οι εξισώσεις (5.2.8) παίρνουν τη παρακάτω αδιάστατη μορφή:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \psi_1}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_1 + n_{tot} \psi_1 + \delta (-|\psi_{-1}|^2 + |\psi_1|^2 + |\psi_0|^2) \psi_1 + \delta \psi_0^2 \psi_{-1}^* \\
i \frac{\partial \psi_0}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_0 + n_{tot} \psi_0 + \delta (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_1|^2) \psi_0 + 2\delta \psi_0^* \psi_{-1} \psi_1 \\
i \frac{\partial \psi_{-1}}{\partial t} &= \hat{H}_0 \psi_{-1} + n_{tot} \psi_{-1} + \delta (|\psi_{-1}|^2 + |\psi_0|^2 - |\psi_1|^2) \psi_{-1} + \delta \psi_0^2 \psi_1^*
\end{aligned}
\tag{5.2.9}$$

με $\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \Omega_{tr}^2 x^2$, όπου $\Omega_{tr} = \frac{3}{2(a_0 + 2a_2)n_0} \left(\frac{\omega_x}{\omega_\perp} \right)$ και $\delta = \frac{c_2^{1D}}{c_0^{1D}} = \frac{a_2 - a_0}{a_0 + 2a_2}$. Ανάλογα με το πρόσημο του δ ξεχωρίζουμε αν το συμπύκνωμα είναι σιδηρομαγνητικό ή αντι-σιδηρομαγνητικό.

5.2.1.1 Θεμελιώδης κατάσταση

Σε πρώτο επίπεδο μελετούμε την θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος. Για να μπορέσουμε να εξάγουμε κάποια αποτελέσματα είναι σκόπιμο να μεταβούμε στο όριο Thomas–Fermi, όπως ακριβώς κάναμε και στην περίπτωση του βαθμωτού συμπυκνώματος. Πριν ξεκινήσουμε, παρατηρώντας τις πεπλεγμένες εξισώσεις (5.2.9) είναι εμφανής η συμμετρία που παρουσιάζουν οι σχέσεις για τις ψ_1, ψ_{-1} συνιστώσες. Στο πλαίσιο λοιπόν μπορούμε να θεωρήσουμε ότι και οι δύο συνιστώσες θα είναι ίσες μεταξύ τους, δηλαδή ότι $\psi_1 = \psi_{-1}$. Έτσι θεωρούμε ότι έχουν τη μορφή

$$\psi_1 = \psi_{-1} = Ae^{-i\mu t} \quad , \quad \psi_0 = 0 \quad (5.2.10)$$

Συνεπώς αντικαθιστώντας τις (5.2.10) στις (5.2.9) αλλά και πηγαινόντας στο όριο που η κινητική ενέργεια των ατόμων είναι μικρή συγκριτικά με τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση προκύπτουν δύο όμοιες σχέσεις οι οποίες συνοψίζονται στη παρακάτω εξίσωση:

$$i\frac{\partial\psi_{\pm 1}}{\partial t} = V_{ext}\psi_{\pm 1} + 2|\psi_{\pm 1}|^2\psi_{\pm 1} \quad (5.2.11)$$

ή

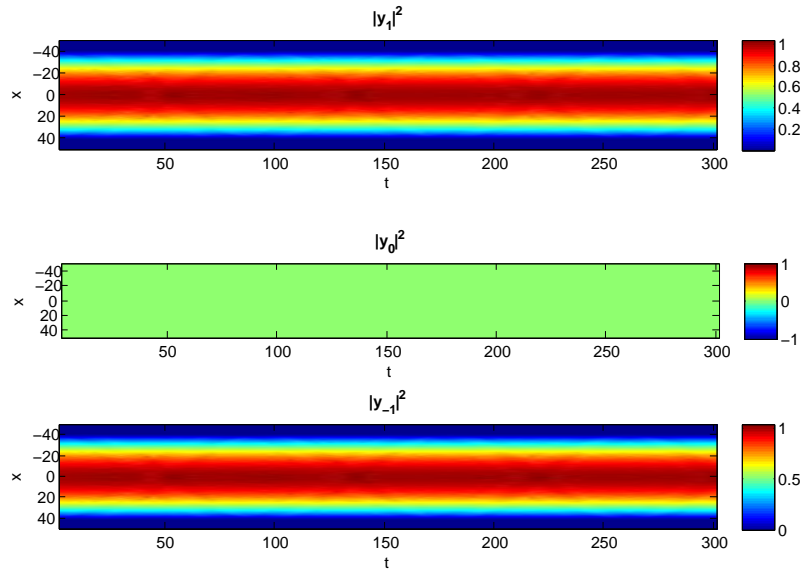
$$\mu A = V_{ext}A + 2A^2A \quad (5.2.12)$$

Προφανώς λύνοντας τη τελευταία σχέση προκύπτει $A = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}}{2}}$ και η σχέση (5.2.10) γίνεται:

$$\psi_1 = \psi_{-1} = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}}{2}} e^{-i\mu t} \quad , \quad \psi_0 = 0 \quad (5.2.13)$$

Παίρνοντας αυτό το συνδυασμό σαν αρχική συνθήκη (για $t = 0$) για το πρόγραμμα μας, εκτελέσαμε τη προσομοίωση και παρατηρήσαμε ότι η επιλογή αυτή των λύσεων ήταν σταθερή και διατηρούσε όχι μόνο τον ολικό αριθμό ατόμων αλλά και τον αριθμό των ατόμων στις επιμέρους καταστάσεις. Αυτό το περιμέναμε διότι η επιλογή των συνιστωσών $\psi_1 = \psi_{-1}$ και $\psi_0 = 0$ είχε ως αποτέλεσμα οι όροι που περιείχαν τη σταθερά δ και είναι υπεύθυνοι για τις αλληλεπιδράσεις των σπιν να μην υπάρχουν. Η εικόνα για το πως αλλάζουν οι πυκνότητες των ατόμων στις διάφορες καταστάσεις φαίνεται στο γράφημα (5.1). Παρατηρούμε ότι τα περισσότερα άτομα βρίσκονται παγιδευμένα στο κέντρο της παγίδας και καθώς απομακρυνόμαστε από αυτήν ο αριθμός αυτός μειώνεται και τελικά μηδενίζεται για περιοχές εκτός του δυναμικού. Επίσης καθώς ο χρόνος κυλάει βλέπουμε αυτό που περιμέναμε θεωρητικά, δηλαδή τη μη μεταφορά ατόμων από τη μία κατάσταση στην άλλη με αποτέλεσμα η κατάσταση ψ_0 να παραμένει συνέχεια χωρίς άτομα.

Ένας άλλος συνδυασμός λύσεων για τη θεμελιώδη κατάσταση του συμπυκνώματος είναι να θεωρήσουμε ότι οι καταστάσεις ψ_1 και ψ_{-1} δεν περιέχουν καθόλου άτομα. Τότε, πάλι



Σχήμα 5.1: Διάγραμμα της μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1(x) = \psi_{-1}(x) = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}(x)}{2}}$

στα πλαίσια του ορίου Thomas–Fermi, δοκιμάζουμε σαν λύσεις τον συνδυασμό:

$$\psi_1 = \psi_{-1} = 0 \quad , \quad \psi_0 = Ae^{i\mu t} \quad (5.2.14)$$

Με αντικατάσταση στις (5.2.9) παίρνουμε την ακόλουθη σχέση:

$$i\frac{\partial\psi_0}{\partial t} = V_{ext}\psi_0 + |\psi_0|^2\psi_0 \quad (5.2.15)$$

ή

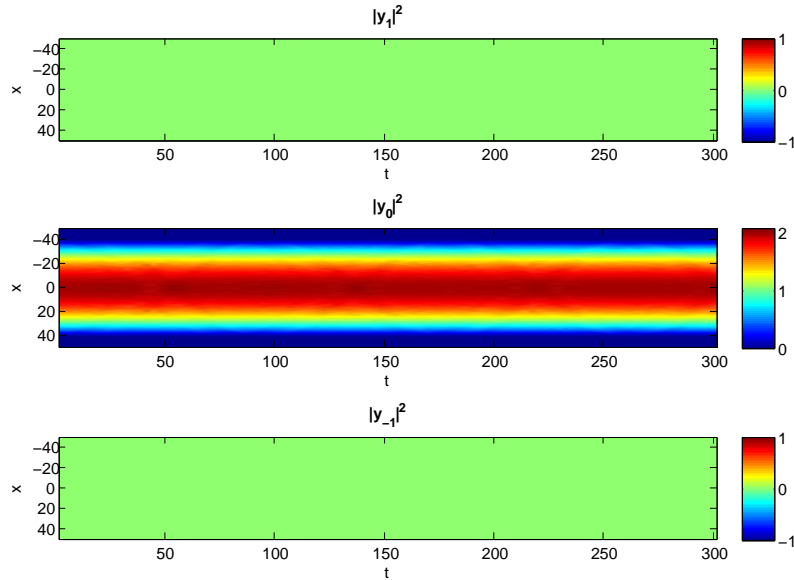
$$\mu A = V_{ext}A + A^2A \quad (5.2.16)$$

από τη λύση της οποίας προκύπτει $A = \sqrt{\mu - V_{ext}}$. Συνεπώς η (5.2.14) γίνεται:

$$\psi_1 = \psi_{-1} = 0 \quad , \quad \psi_0 = \sqrt{\mu - V_{ext}}e^{-i\mu t} \quad (5.2.17)$$

Εκτελώντας τη προσομοίωση με αυτές τις λύσεις σαν αρχικές συνθήκες προκύπτει το γράφημα (5.2) για τις πυκνότητες των ατόμων.

Αυτό που παρατηρούμε πάλι είναι ότι οι πυκνότητες παραμένουν σταθερές με το χρόνο χωρίς να μετακινούνται άτομα από τη μια κατάσταση στην άλλη. Ο λόγος που αυτό γίνεται είναι πάλι η έλλειψη των όρων με τη παράμετρο δ με αποτέλεσμα οι συνιστώσες μεταξύ τους να μην αλληλεπιδρούν.



Σχήμα 5.2: Διάγραμμα μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1(x) = \psi_{-1}(x) = 0$ και $\psi_0(x) = \sqrt{\mu - V_{ext}(x)}$

Σαν τελευταίο συνδυασμό μπορούμε να επιλέξουμε τη περίπτωση:

$$\psi_1 = \psi_0 = Ae^{-i\mu t} \quad , \quad \psi_{-1} = 0 \quad (5.2.18)$$

Παρατηρούμε ότι τώρα δεν υπάρχει η συμμετρία μεταξύ των ψ_1 και ψ_{-1} . Αντικαθιστώντας το συνδυασμό αυτό των λύσεων στις μη γραμμικές εξισώσεις, από την εξίσωση για τη συνιστώσα ψ_{-1} προκύπτει ο περιορισμός:

$$\delta\psi_0^2\psi_1^* = 0 \quad (5.2.19)$$

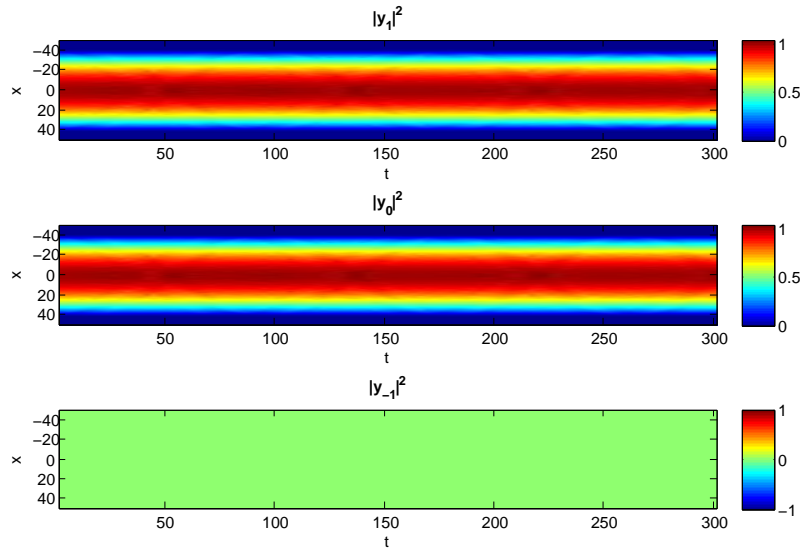
από τον οποίο έχουμε $\delta = 0$. Τελικά λαμβάνοντας υπόψιν τον περιορισμό αυτό η λύση μας γίνεται:

$$\psi_1 = \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}}{2}} e^{-i\mu t} \quad , \quad \psi_{-1} = 0 \quad (5.2.20)$$

πάντα με τον περιορισμό $\delta = 0$. Εκτελώντας ξανά την προσομοίωση παίρνουμε το γράφημα (5.3). Πάλι παρατηρούμε τη σταθερότητα των λύσεων μας. Το αξιοσημείωτο στη περίπτωση αυτή είναι βέβαια το γεγονός ότι η ασυμμετρία των λύσεων είχε ως αποτέλεσμα το μηδενισμό των αλληλεπιδράσεων των σπιν.

5.2.1.2 Σολιτονικού τύπου λύσεις

Στη προηγούμενη παράγραφο μελετήσαμε τη θεμελιώδη κατάσταση του σπινωριακού συμπυκνώματος στο όριο Thomas–Fermi. Όπως δείξαμε και στη περίπτωση του βαθμωτού συμπυκνώματος, μπορούμε σαν λύσεις να πάρουμε τα σολιτόνια. Στο σπινωριακό συμπύ-



Σχήμα 5.3: Διάγραμμα μεταβολής της πυκνότητας των ατόμων σε κάθε κατάσταση στο όριο Thomas–Fermi με $\psi_1 = \psi_0 = \sqrt{\frac{\mu - V_{ext}}{2}}$ και $\psi_{-1} = 0$ για $\delta = 0$

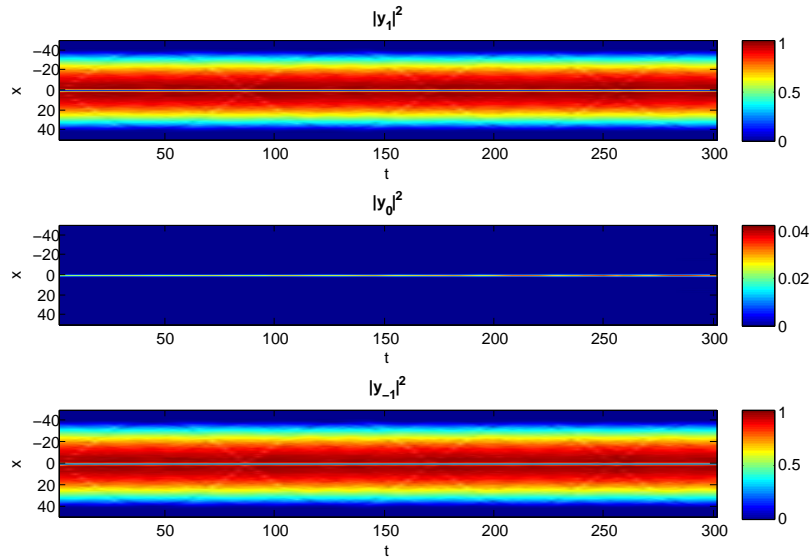
κνωμα μελετάμε τη λύση στην οποία η ψ_1 και η ψ_{-1} περιγράφουν σκοτεινό σολιτόνιο και η ψ_0 φωτεινό. Στη παρούσα εργασία θεωρούμε ότι το συμπύκνωμα είναι αντισιδηρομαγνητικό ($\delta > 0$) με απωστικές αλληλεπιδράσεις ($c_0 > 0$). Το αξιοσημείωτο στην ανάλυση μας είναι ότι το φωτεινό σολιτόνιο παραμένει σταθερό παρόλο που οι αλληλεπιδράσεις είναι απωστικές. Αυτό συμβαίνει γιατί το σκοτεινό σολιτόνιο δημιουργεί έναν μηχανισμό παγίδευσης με αποτέλεσμα το φωτεινό σολιτόνιο να το νιώθει σαν δυναμικό. Μπορούμε δηλαδή να πούμε ότι το σκοτεινό σολιτόνιο δημιουργεί ουσιαστικά έναν κυματοδηγό για το φωτεινό όμοιο με αυτόν που έχει προταθεί στη μη γραμμική οπτική. Τα σολιτόνια που μελετάμε και που θα ολοκληρώσουμε αριθμητικά είναι μικρού πλάτους και τη χρονική στιγμή $t = 0$ χαρακτηρίζονται από εξισώσεις:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) = \psi_{-1}(x) &= \sqrt{\frac{\mu - U(x)}{2}} \tanh(\sqrt{v}(x - x_0)) \\ \psi_0 &= v^{3/4} \sqrt{\frac{\xi}{\eta\sqrt{\mu}}} \operatorname{sech}[\sqrt{v}(x - x_0)] \end{aligned} \quad (5.2.21)$$

όπου $\Omega_{tr} = 0,05$, $\eta = 1$, $v = 0,13$, $\xi = 0,5$ και $\delta = 0,0314$.

Για αρχή θεωρούμε ότι τα σολιτόνια βρίσκονται στο κέντρο του δυναμικού παγίδευσης, δηλαδή $x_0 = 0$. Εκτελώντας την ολοκλήρωση παίρνουμε το γράφημα (5.4) στο οποίο παρατηρούμε ότι τα σολιτόνια παραμένουν στο κέντρο σε όλη τη χρονική διάρκεια. Ουσιαστικά είναι σαν να μην αλληλεπιδρούν με το δυναμικό. Γεγονός που το περιμέναμε αφού μπορούμε να θεωρήσουμε ότι έχουν σωματιδιακή υπόσταση.

Στη συνέχεια εξετάζουμε τη περίπτωση στην οποία τα σολιτόνια βρίσκονται πιο μακριά



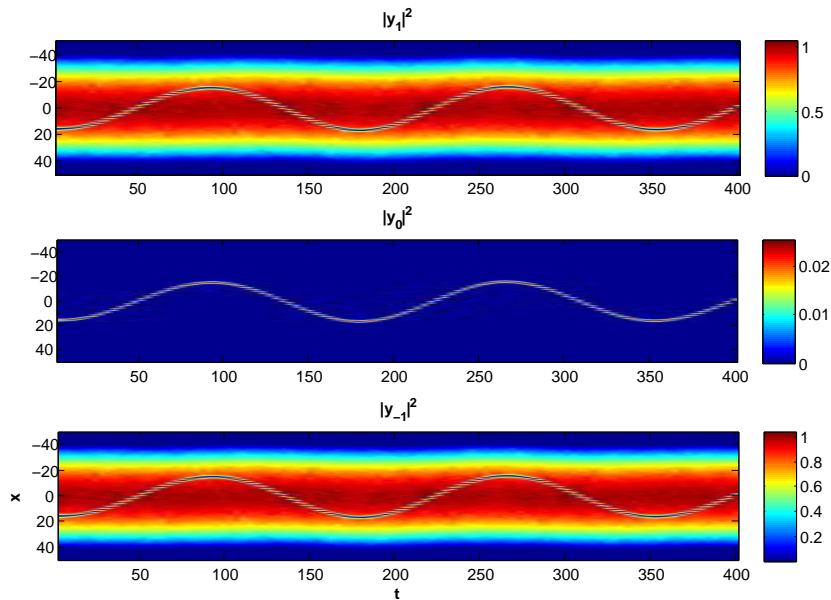
Σχήμα 5.4: Σολιτόνια στο κέντρο του δυναμικού παγίδευσης

από το κέντρο της παγίδας στη θέση $x_0 = 15$ χωρίς όμως να λάβουμε υπόψιν τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σπίν, δηλαδή με $\delta = 0$. Το συμπέρασμα που εξάγουμε είναι ότι πλέον και τα δύο είδη σολιτονίων εκτελούν αρμονικές ταλαντώσεις με συχνότητα $\omega = \frac{\Omega_{tr}}{\sqrt{2}}$ όπως φαίνεται στο σχήμα (5.5). Το αποτέλεσμα αυτό συμπίπτει με το αποτέλεσμα που έχει εξαχθεί για το σκοτεινό σολιτόνιο στη περίπτωση βέβαια του βαθμωτού συμπυκνώματος [18]. Όπως είπαμε και στην αρχή της παραγράφου το φωτεινό σολιτόνιο δεν παραμορφώθηκε μέσα στο πέρασμα του χρόνου παρόλο που οι αλληλεπιδράσεις είναι απωστικές και ακολούθησε στη ταλάντωση το σκοτεινό το οποίο λειτούργησε σαν κυματοδηγός. Εξίσου σημαντικό είναι και το γεγονός ότι και το φωτεινό σολιτόνιο εκτέλεσε τη ταλάντωση με συχνότητα $\omega = \frac{\Omega_{tr}}{\sqrt{2}}$ ίδια δηλαδή με του σκοτεινού παρόλο που στα συμπυκνώματα με μία συνιστώσα έχει αποδειχθεί ότι η συχνότητα του είναι $\omega = \Omega_{tr}$

Ας εξετάσουμε τι συμβαίνει στη περίπτωση που εισάγουμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σπίν. Μέσα από μια θεωρητική και ημιαναλυτική προσέγγιση του προβλήματος έχει αποδειχθεί ότι για σολιτόνια που εκτελούν ταλαντώσεις με μικρό πλάτος (ρηχά σολιτόνια), όπως συμβαίνει στη περίπτωση μας, η συχνότητα ταλάντωσης τους είναι [16] :

$$\omega_{semi} = \frac{\Omega_{tr}}{\sqrt{2}}(1 - \alpha\sqrt{\delta}) - \varepsilon \quad (5.2.22)$$

όπου $\varepsilon \equiv \beta \frac{\Omega_{tr}}{\sqrt{2}} \approx 10^{-4}$ για το πρόβλημα μας και $\alpha = 0,151$ [16] Παρατηρούμε δηλαδή ότι τώρα η σχέση αυτή γενικεύει τη σχέση για τη συχνότητα των σολιτονίων που βρίσκουμε στα συμπυκνώματα μιας ή δύο συνιστωσών. Συγκεκριμένα η συχνότητα μικραίνει καθώς η αλληλεπίδραση μεταξύ των σπίν μεγαλώνει και άρα τα σολιτόνια εκτελούν πιο αργές ταλαντώσεις. Για να εξακριβώσουμε την ακρίβεια της σχέσης αυτής εκτελέσαμε την ολοκλήρωση



Σχήμα 5.5: Ταλάντωση σολιτονίων με $\delta = 0$. Η συχνότητα τους συμπίπτει με αυτή που υπολογίζουμε στα συμπυκνώματα μιας ή δύο συνιστωσών.

των πεπλεγμένων εξισώσεων με τη σταθερά αλληλεπίδρασης να έχει τιμή $\delta = 0.0314$.

Για τις τιμές που έχουμε επιλέξει η συχνότητα από την ημιαναλυτική προσέγγιση προκύπτει να είναι $\omega_{semi} = 0,03431$ ενώ από τη προσομείωση βρίσκουμε $\omega_{sim} = 0,03449$. Παρατηρούμε δηλαδή ότι το λάθος είναι πολύ μικρό. Το σημαντικό επίσης αποτέλεσμα είναι ότι η συχνότητα έπαθε ακριβώς αυτό που περιμέναμε, δηλαδή να ελαττωθεί εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σπίν. Βέβαια πρέπει να επισημάνουμε ότι η παραπάνω ανάλυση ισχύει στη περίπτωση που τα σολιτόνια έχουν μικρό πλάτος ταλάντωσης. Σε διαφορετική περίπτωση που το πλάτος των σολιτονίων είναι μεσαίο ή μεγάλο η ημιαναλυτική προσέγγιση για τη σχέση της συχνότητας δεν ισχύει.

Κεφάλαιο 6

Επίλογος και Συμπεράσματα

Μετά τη πρώτη πειραματική πραγματοποίηση του συμπυκνώματος Bose–Einstein το 1995 στα αραιά ατομικά αέρια η μελέτη των κβαντικών αερίων έχει κεντρίσει το ενδιαφέρον πολλών επιστημόνων από όλα τα πεδία της φυσικής. Η αρχική ιδέα έχει τις ρίζες το 1925 όταν ο Einstein βασιζόμενος σε μια εργασία του Bose για τη στατιστική περιγραφή των φωτονίων προέβλεψε την αλλαγή φάσης σε αέρια με μη αλληλεπιδρώντα άτομα. Βέβαια η πειραματική κατασκευή του εκείνη την εποχή ήταν δύσκολη εξαιτίας της μη επαρκούς τεχνολογίας. Έτσι το 1995 διάφορες πειραματικές ομάδες συνδυάζοντας τις διάφορες τεχνικές ψύξης κατάφεραν να φτάσουν στις επιθυμητές θερμοκρασίες και πυκνότητες για το συμπύκνωμα. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα να ανοίξει ο δρόμος για τη μελέτη των αερίων τόσο σε θεωρητικό όσο και σε πειραματικό επίπεδο.

Στη παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύξαμε αρχικά το μαθηματικό φορμαλισμό που χρειάζεται για να περιγράψουμε το νέο αυτό φαινόμενο. Ακρογωνιαίος λίθος της προσπάθειάς μας ήταν η εξίσωση Gross–Pitaevskii, η οποία στο επίπεδο της μέσης θεωρίας πεδίου περιγράφει με συστηματικό τρόπο τη συμπεριφορά του συμπυκνώματος. Στη συνέχεια ορίσαμε τη θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος των αλληλεπιδρώντων ατόμων παρουσία δυναμικού και εξάγαμε ακριβή έκφραση για την πυκνότητα των ατόμων. Κατόπιν μελετήσαμε το σπινωριακό συμπύκνωμα στο οποίο λάβαμε υπόψιν και τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των εσωτερικών βαθμών ελευθερίας των ατόμων. Έιδαμε ότι η κυματοσυνάρτηση που το περιγράφει από βαθμωτή γίνεται διανυσματική με τρεις συνιστώσες μία για κάθε κατάσταση. Τέλος αναφέραμε στοιχεία της θεωρίας των σολιτονίων, τα οποία αποτελούν τις στοιχειώδεις μη γραμμικές διεγέρσεις του συμπυκνώματος, και λύνοντας τις πεπλεγμένες εξισώσεις εξάγαμε το συμπέρασμα ότι η συχνότητα των ταλαντώσεων που εκτελούν στο σπινωριακό συμπύκνωμα μικραίνει όσο η αλληλεπίδραση μεταξύ των σπίν των ατόμων γίνεται πιο ισχυρή γεγονός που έρχεται σε συμφωνία με τις ημιανλυτικές προσεγγίσεις.

Όλη η ανάλυση της θεωρίας μας βασίστηκε στη παραδοχή ότι τα αέρια είναι αραιά και σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες ώστε οι κβαντικές και θερμικές διακυμάνσεις να θεωρούνται αμελητέες. Μια ενδιαφέρουσα ερώτηση είναι πως όλος αυτός ο φορμαλισμός αλλάζει στη περίπτωση που η κυματοσυνάρτηση δεν είναι ένα κλασικό πεδίο αλλά έχει και όρους διαταρακτικούς. Ακόμα ενδιαφέρον παρουσιάζει το ερώτημα του κατά πόσον αλλάζει η συμπεριφορά των σολιτονίων στη περίπτωση που το δυναμικό παγίδευσης είναι περιοδικό και όχι αρμονικό. Τέλος από πειραματική σκοπιά χρήζει περαιτέρω μελέτης η παρατήρηση σολιτονίων στα σπινωριακά συμπυκνώματα αλλά και οι αλλαγές που παρουσιάζουν αυτά σε περιβάλλον με πεπερασμένη θερμοκρασία.

Βιβλιογραφία

- [1] Lev Pitaevskii and Sandro Stringari, *Bose–Einstein Condensation*, Oxford University Press, Oxford (2003)
- [2] C.J.Pethick and H.Smith, *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge (2008)
- [3] Γρηγόριος Χ.Ψαλτάκης, *Κβαντικά Συστήματα Πολλών Σωματιδίων*, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο (2008)
- [4] Franco Dalfovo *et al*, *Theory of Bose–Einstein Condensation in Trapped Gases*, Rev.Mod.Phys.**71**, 3 (1999)
- [5] Sandro Stringari, *Bose–Einstein Condensation and Superfluidity in Trapped Atomic Gases*, arXiv:cond–mat/0101299v1 (2001)
- [6] Alexander L. Fetter and Christofer J. Foot, *Bose Gas:Theory and Experiment*, arXiv:1203.3183v1[cond–mat.quant–gas], (2012)
- [7] Wolfgang Ketterle, *When Atoms Behave as Waves:Bose–Einstein Condensation and the Atom Laser*, Nobel Lecture (2001)
- [8] E.A.Cornell and C.E.Wieman, *Nobel Lecture:Bose–Einstein in a Dilute Gas, the First 70 Years and Some Recent Experiments*, Rev.Mod.Phys.**74**,3 (2002)
- [9] Yvan Castin, *Bose–Einstein Condensates in Atomic Gases:Simple Theoretical Results*, arXiv:cond–mat/0105058v1 (2001)
- [10] Tin–Lu Ho, *Spinor Bose Condensates in Optical Traps*, arXiv:cond–mat/9803231v1 (1998)
- [11] Tetsuo Ohmi and Kazushige Machida, *Bose–Einstein Condensation with Internal Degrees of Freedom in Alkali Atom Gases*, arXiv:cond–mat/9803160v1, (1998)
- [12] Ming–Shien Chang, *Coherent Spin Dynamics of a Spin–1 Bose–Einstein Condensate*, PhD thesis, School of Physics, Georgia Institute of Technology (2006)

- [13] C.K.Law , H.Pu and N.P.Bigelow , *Quantum Spin Mixing of Spinor Bose–Einstein Condensates*, arXiv:cond–mat/9807258v1, (1998)
- [14] Wenxian Zhang , Su Yi and L.You , *Bose–Einstein Condensation of Trapped Interacting Spin–1 Atoms*, arXiv:cond–mat/0409680v1, (2004)
- [15] Wenxian Zhang and L.You , *An Effective Quasi–One–Dimensional Description of a Spin–1 Atomic Condensate*, arXiv:cond–mat/0412300v2, (2005)
- [16] H.E.Nistazakis *et al*, *Bright–Dark Soliton Complexes in Spinor Bose–Einstein Condensates*, Phys.Rev.A **77**,033612, (2008)
- [17] D.J.Frantzeskakis, *Dark Solitons in Atomic Bose–Einstein Condensates:From Theory to Experiments*, arXiv:1004.4071v1[cond–mat.quant–gas], (2010)
- [18] Th. Busch and J.R.Anglin, *Motion of Dark Solitons in Trapped Bose–Einstein Condensates*, Phys.Rev.Letters **84**, 11 (2000)
- [19] Th. Busch and J.R.Anglin, *Dark–Bright Solitons in Inhomogeneous Bose–Einstein Condensates*, Phys.Rev.Letters **87**, 1 (2001)
- [20] Wolfgang Ketterle, *Spinor Condensate and Light Scattering From Bose–Einstein Condensates*, arXiv:cond–mat/0005001v1, (2000)
- [21] Jianke Yang, *Non Linear Waves in Integrable and Nonintegrable Systems*, Siam (2010)
- [22] Nouredine Zettili, *Quantum Mechanics , Concepts and Applications*, John Wiley and Sons LTD, England , (2001)