



ΕΘΝΙΚΟ & ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ  
Τμήμα Φυσικής

*Π.Μ.Σ Φυσικής - Κατεύθυνση Πυρηνική Φυσική και Φυσική  
Στοιχειωδών Σωματιδίων*

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

*Κβαντικές συσχετίσεις συστήματος δύο  
αλληλεπιδρώντων σωματιδίων σε απειρόβα-  
θο πηγάδι*

Σμπόνιας Αθανάσιος

*Επιβλέπων:*

Φώτιος Διάκονος

Αν. Καθηγητής

Αθήνα 2017



---

## Περιεχόμενα

---

Κατάλογος σχημάτων	5
Κατάλογος πινάκων	6
<b>1 Συστήματα πολλών σωμάτων</b>	<b>7</b>
1 Εισαγωγή . . . . .	7
2 Ολοκληρώσιμα Μοντέλα . . . . .	9
3 Θεώρημα απεικόνισης μποζονίων σε φερμιόνια . . . . .	11
4 Μοντέλο Lieb-Liniger . . . . .	14
4.1 Εξισώσεις Bethe . . . . .	18
4.2 Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης . . . . .	19
<b>2 Μελέτη συστήματος δύο αλληλεπιδρώντων μποζονίων</b>	<b>21</b>
1 Χαμιλτονιανή . . . . .	21
2 Προσδιορισμός συνοριακών συνθηκών . . . . .	22

2.1	Σύστημα συντεταγμένων θέσης . . . . .	23
2.2	Σύστημα κέντρου μάζας . . . . .	26
3	Προσδιορισμός κυματοσυνάρτησης . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Υπολογισμός φυσικών μεγεθών</b>	<b>34</b>
1	Αριθμητική επίλυση εξισώσεων . . . . .	34
2	Μελέτη κβαντικών συσχετίσεων . . . . .	37
2.1	Ενεργειακό φάσμα . . . . .	37
2.2	Ενέργεια του συστήματος . . . . .	38
2.3	Εξέλιξη της κατάστασης του συστήματος . . . . .	40
2.4	Πίνακας πυκνότητας . . . . .	42
2.5	Κατανομή ορμής . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Επίλογος</b>	<b>47</b>

---

## Κατάλογος Σχημάτων

---

1.1	Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης συναρτήσει της σταθεράς αλληλεπίδρασης $\gamma$ . . . . .	20
2.1	Δύο αλληλεπιδρώντα σωματίδια σε απειρόβαθο πηγάδι . . . . .	22
2.2	Σύστημα συντεταγμένων $x_1, x_2$ . . . . .	24
2.3	Σύστημα κέντρου μάζας και σχετικής θέσης . . . . .	28
3.1	Αριθμητικός προσδιορισμός του $K$ . . . . .	35
3.2	Αριθμητικός προσδιορισμός του $k$ . . . . .	36
3.3	Ενεργειακό φάσμα . . . . .	39
3.4	Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης . . . . .	39
3.5	Ενέργεια πρώτης διεγερμένης κατάστασης . . . . .	40
3.6	Θεμελιώδης κατάσταση . . . . .	41
3.7	Πρώτη διεγερμένη κατάσταση . . . . .	41
3.8	Ανηγμένος πίνακας πυκνότητας . . . . .	44

3.9 Κατανομή ορμής . . . . .	46
------------------------------	----

---

## Κατάλογος Πινάκων

---

- 3.1 Πίνακας τιμών των μεταβλητών  $K, k$  για τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης  $c = 1$  και  $c = 100$  . . . . . 36
- 3.2 Πίνακας τιμών των μεταβλητών  $K, k$  για  $c = 0.1$  και  $c = 5$  . . . . . 38

# Κεφάλαιο 1

---

## Συστήματα πολλών σωμάτων

---

### 1. Εισαγωγή

Η μελέτη φυσικών συστημάτων, τα οποία αποτελούνται από τρία ή περισσότερα υποσυστήματα, παρουσιάζει πολύ μεγάλη δυσκολία στην περίπτωση που αυτά αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Ακόμα και όταν αναφερόμαστε σε κλασικά συστήματα, αναλυτικές εκφράσεις μπορούν να βρεθούν μόνο για την περίπτωση δύο αλληλεπιδρώντων σωμάτων χρησιμοποιώντας τις συντεταγμένες του κέντρου μάζας του συστήματος και της σχετικής θέσης των δύο υποσυστημάτων του. Το πρόβλημα των τριών σωμάτων, όπως είναι το σύστημα Γης-Ήλιου-Σελήνης, το οποίο έχει απασχολήσει σπουδαίους επιστήμονες του παρελθόντος συνεχίζει να μελετάται ακόμα και σήμερα καθώς δεν έχει αναλυτική λύση.

Τον περασμένο αιώνα, με την θεμελίωση της κβαντομηχανικής και της κατανόησης των νόμων που διέπουν τον μικρόκοσμο, προέκυψε η ανάγκη περιγραφής μακροσκοπικών συστημάτων με όρους κβαντομηχανικής. Φυσικά συστήματα, όπως για παράδειγμα ένα μέταλλο ή ένα αέριο, αποτελούνται συνήθως



από μεγάλο αριθμό ( $N$ ) υποσυστημάτων-σωματιδίων με  $N \sim 10^{23}$ . Η αναλυτική περιγραφή επομένως τέτοιων συστημάτων, όπου οι βαθμοί ελευθερίας πρακτικά είναι άπειροι, καθίσταται σχεδόν αδύνατη. Για τον λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι όπως είναι η δεύτερη κβάντωση, με την οποία όμως δεν θα σχοληθούμε στην παρούσα εργασία.

Με βάση λοιπόν αυτήν την θεώρηση, αναδείχθηκε μια καινούργια κατηγορία προβλημάτων τα οποία είναι γνωστά στην βιβλιογραφία ως "πρόβλημα των πολλών σωματιδίων (many-body problem)". Ο όρος αυτός, ουσιαστικά αναφέρεται σε μια μεγάλη κατηγορία φυσικών προβλημάτων τα οποία σχετίζονται με την μελέτη των ιδιοτήτων συστημάτων τα οποία αποτελούνται από μεγάλο αριθμό ( $N$ ) αλληλεπιδρώντων σωματιδίων με  $3 \leq N \leq \infty$ . Στην περίπτωση τώρα όπου τα συστήματα αποτελούνται από μικρό αριθμό καλά ορισμένων δομικών συστατικών  $N$  έχουμε τα λεγόμενα "συστήματα μερικών σωματιδίων (few-body systems)". Παραδείγματα τέτοιων συστημάτων είναι τα μικρά μόρια, ελαφρά άτομα, καθώς επίσης και συγκεκριμένα συστήματα της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης και φυσικής επιφανειών όπως είναι οι κβαντικές τελείες (quantum dots) <sup>1</sup>.

Τις τελευταίες δεκαετίες και ιδιαίτερα μετά την πειραματική επιβεβαίωση το 1995 του συμπυκνώματος Bose-Einstein, προβλήματα πολλών σωματιδίων έχουν τύχει μεγάλου ενδιαφέροντος από την επιστημονική κοινότητα τόσο σε θεωρητικό όσο και πειραματικό επίπεδο καθώς και σε αυτό της προσομοίωσης, αφού πέραν όλων των άλλων η μελέτη και κατανόηση τέτοιων συστημάτων μπορεί να έχει και άμεσες τεχνολογικές εφαρμογές.

<sup>1</sup>Few-Body Systems: <https://link.springer.com/journal/601>

## 2. Ολοκληρώσιμα Μοντέλα

Οι μαθηματικές αρχές έχουν θεμελιώδη ρόλο στην κατανόηση προβλημάτων της κβαντικής φυσικής. Το θέμα της ‘ακριβούς επιλυσιμότητας’ αρχικά προέκυψε από τις πρώιμες μελέτες πάνω σε κλασικά δυναμικά συστήματα τα οποία περιγράφονταν από διαφορικές εξισώσεις. Συνήθως η λύση αυτών των εξισώσεων ισοδυναμεί με τον καθορισμό μεγεθών μέσω των ολοκληρωμάτων κίνησης. Υπό αυτή την έννοια η κλασική ολοκληρωσιμότητα είναι συνώνυμη με την ακριβή λύση του προβλήματος. Όσον αφορά την εννοιολογική κατανόηση της κβαντικής ολοκληρωσιμότητας, αυτή θα πρέπει να αποδοθεί αρχικά στον Hans Bethe και στην καταλυτική εργασία του για τον προσδιορισμό των ενεργειακών καταστάσεων της αλυσίδας spin του Heisenberg με αλληλεπίδραση πρώτων γειτόνων το 1931 [2]. Στην εργασία αυτή πρότεινε μια ειδική μορφή της κυματοσυνάρτησης του συστήματος, το Bethe Ansatz όπως ονομάζεται, η οποία δίνεται από την υπέρθεση όλων των δυνατών μεταθέσεων επίπεδων κυμάτων πάνω σε έναν δακτύλιο μεγέθους  $L$ . Η μορφή της επομένως θα είναι

$$\psi = \sum_{\mathcal{P}} A(\mathcal{P}) e^{i(k_{\mathcal{P}_1} \cdot x_1 + \dots + k_{\mathcal{P}_N} \cdot x_N)} \quad (1.1)$$

όπου  $N$  είναι ο αριθμός των spin-κάτω και  $\mathcal{P}_1 \dots \mathcal{P}_N$  αντιστοιχεί σε μία μετάθεση  $\mathcal{P}$  των  $1, 2, \dots, N$ . Υπάρχουν συνολικά  $N!$  μεταθέσεις των κυματάρημων  $k_i$  και το άθροισμα των επίπεδων κυμάτων που προκύπτουν από αυτές τις μεταθέσεις, πολλαπλασιασμένο με το βάρος  $A(\mathcal{P})$ , μας δίνει την κυματοσυνάρτηση του συστήματος πολλών σωματιδίων. .

Το 1963 οι Lieb-Liniger χρησιμοποίησαν την υπόθεση του Bethe για την μορφή της κυματοσυνάρτησης για να λύσουν το μονοδιάστατο πρόβλημα συστήματος μποζονίων τα οποία αλληλεπιδρούν σημειακά μέσω  $\delta$ -συναρτήσεων. Το

πρόβλημα αυτό, αν και θεωρείται το απλούστερο πρόβλημα πολλών σωματιδίων, εντούτοις παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον όσον αφορά τη μεθοδολογία επίλυσης του.

Η ακριβής λύση του προβλήματος δίνεται συναρτήσει των κυματαριθμών  $k_i$  οι οποίοι θα πρέπει να ικανοποιούν ένα σύνολο εξισώσεων που ονομάζονται εξισώσεις Bethe ενώ το ενεργειακό φάσμα είναι ένα άθροισμα πάνω σε όλα τα  $k_i^2$ . Στην πραγματικότητα οι εξισώσεις Bethe περιγράφουν τη συμμετοχή των επιμέρους σωματιδίων στις κβαντικές συσχετίσεις του συστήματος των πολλών σωματιδίων. Η σημασία της κβαντικής ολοκληρωσιμότητας μέσω των συσχετίσεων αυτών είναι τέτοια ώστε μας δίνει την δυνατότητα καλύτερης και λεπτομερέστερης κατανόησης μιας ευρύτερης κλάσης συστημάτων πολλών σωματιδίων όπως είναι τα ισχυρά αλληλεπιδρώντα ηλεκτρονικά συστήματα, οι αλυσίδες spin, τα αλληλεπιδρώντα κβαντικά αέρια κ.λ.π. Πρωτού περάσουμε στην περιγραφή των κυριότερων σημείων του μοντέλου Lieb-Liniger θα παρουσιάσουμε το λεγόμενο 'Θεώρημα απεικόνισης μποζονίων σε φερμιόνια' που αποδείχθηκε από τον Marvin D. Girardeau.

### 3. Θεώρημα απεικόνισης μποζονίων σε φερμιόνια

Ένα από τα πρώτα συστήματα πολλών σωματιδίων που προτάθηκαν και λύθηκαν αναλυτικά είναι το λεγόμενο κβαντικό αέριο Tonks-Girardeau (TG gas) το οποίο προτάθηκε για πρώτη φορά από τον Lewi Tonks το 1936 [11]. Από φυσικής άποψης το αέριο αυτό μπορεί να ιδωθεί ως ένα μονοδιάστατο ισχυρά συσχετισμένο κβαντικό αέριο το οποίο αποτελείται από μποζόνια που θεωρούνται ως μη διαπερατές σκληρές σφαίρες (impenetrable 'hard-core' bosons) και αλληλεπιδρούν ισχυρά με δυναμικό δ-συνάρτησης (hardcore interactions) όταν το σύστημα βρίσκεται σε θερμοκρασία κοντά στο απόλυτο μηδέν ( $T \approx 0$ ). Ο M. Girardeau κατέληξε το 1960 [5] στην επίλυση του συγκεκριμένου μοντέλου μέσω του Θεώρηματος απεικόνισης μποζονίων σε φερμιόνια (**Bose-Fermi Mapping Theorem**) το οποίο περιγράφει τη σχέση μεταξύ μποζονικών και φερμιονικών συστημάτων σε μία διάσταση.

Οι περιορισμοί οι οποίοι πρέπει να τίθενται έτσι ώστε να έχει ισχύ το θεώρημα είναι οι εξής:

- ▶ τα συστήματα θα πρέπει να είναι μονοδιάστατα
- ▶ οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων να είναι σημειακές και πολύ ισχυρές. Η περίπτωση αυτή είναι γνωστή ως το μή διαπερατό όριο (impenetrable point interactions) ή **όριο Tonks-Girardeau**.

Η συνθήκη που αφορά το μή διαπερατό όριο μπορεί να αναπαρασταθεί πρακτικά από την σχέση:

$$\psi(x_1, \dots, x_N) = 0 \text{ όταν } |x_j - x_l| \leq \alpha, \text{ και } 1 \leq j < l \leq N \quad (1.2)$$

όπου  $x_1, x_2, \dots, x_N$  είναι οι συντεταγμένες των σωματιδίων που απαρτίζουν το σύστημα και  $a$  το εύρος της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης. Στην περίπτωση αυτή επομένως οι αλληλεπιδράσεις δεν είναι απολύτως σημειακές!

Η γενική μορφή της εξίσωσης Schrödinger είναι η εξής :

$$(T + V)\psi = E\psi \quad (1.3)$$

όπου ο τελεστής  $T$  περιλαμβάνει στους κινητικούς όρους και ο τελεστής  $V$  τους όρους αλληλεπίδρασης και πιθανά ένα εξωτερικό δυναμικό. Θεωρούμε μια κυματοσυνάρτηση που περιγράφει φερμιόνια  $\psi^F$  η οποία είναι αντισυμμετρική στην εναλλαγή μεταξύ δύο οποιονδήποτε συντεταγμένων των σωματιδίων και ικανοποιεί την παραπάνω εξίσωση Schrödinger . Επιπλέον ορίζουμε και μια 'μοναδιαία αντισυμμετρική συνάρτηση' ως εξής:

$$A(x_1, \dots, x_N) = \prod_{j>l} \text{sgn}(x_j - x_l) \quad (1.4)$$

Η συνάρτηση αυτή παίρνει τις τιμές  $A = +1$  ή  $A = -1$ , αναλόγως με το αν έχουμε άρτιο ή περιττό αριθμό μεταθέσεων των  $1 \dots N$  σωματιδίων όταν τα  $x_j$  είναι διατεταγμένα ως  $x_{p_1} < x_{p_2} < \dots < x_{p_N}$  Έτσι λοιπόν το γινόμενο

$$\psi^B = \psi^F \cdot A \quad (1.5)$$

είναι συμμετρικό στις εναλλαγές των συντεταγμένων των σωματιδίων και επομένως περιγράφει ένα σύστημα μποζονίων με την προϋπόθεση βέβαια ότι ικανοποιούνται οι κατάλληλες συνθήκες. Πρώτα παρατηρούμε ότι η σχέση (1.4) παρουσιάζει ανωμαλίες στους επιφανειακούς, όπως λέγονται όρους, στα σημεία  $x_j = x_l$  όπου οι συντεταγμένες δύο σωματιδίων συμπίπτουν . Η κυματοσυνάρτηση  $\psi^B$  των μποζονίων όμως είναι συνεχής ακόμα και σε αυτά τα όρια, αφού η

$\psi^F$  μηδενίζεται εκεί λόγω της συνθήκης (1.2). Επιπλέον τα σημεία όπου  $x_j = x_i$  διαμερίζουν το  $N$ -διάστατο χώρο σε επιμερους  $N!$  ξεχωριστές περιοχές στις οποίες η συνάρτηση  $A$  είναι σταθερή και παίρνει τιμές  $A = +1$  ή  $A = -1$ . Αυτά έχουν ως αποτέλεσμα η  $\psi^B$  να ικανοποιεί την εξίσωση (1.3) σε όλο τον χώρο όπου  $|x_j - x_i| > \alpha$  (για  $x_j \neq x_i$ ) με την προϋπόθεση ότι και η  $\psi^F$  κάνει το ίδιο. Στην περίπτωση τώρα όπου  $|x_j - x_i| \rightarrow \alpha$  συνεπάγεται, για τους ίδιους λόγους με πριν, ότι  $\psi^B \rightarrow 0$ . Τέλος η κυματοσυνάρτηση  $\psi^B$  θα ικανοποιεί τις παρανω συνθήκες αν τις ικανοποιεί και η  $\psi^F$  και μάλιστα, στην περίπτωση όπου έχουμε περιττό αριθμό σωματιδίων, θα πρέπει οι συνθήκες αυτές να είναι περιοδικές. Με βάση αυτά λοιπόν μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η κυματοσυνάρτηση  $\psi^B$  αποτελεί λύση της εξίσωσης (1.3) ικανοποιώντας στατιστική Bose-Einstein και τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.

Θα πρέπει να τονίσουμε εδώ ότι η ανάλυση που προηγήθηκε αφορά αποκλειστικά μονοδιάστατα συστήματα. Στην περίπτωση συστημάτων δύο ή περισσότερων διαστάσεων δεν υπάρχει αντίστοιχη αντισυμμετρική συνάρτηση  $A$  αφού τώρα οι συντεταγμένες των σωματιδίων είναι διανύσματα και όχι βαθμωτές ποσότητες. Στην περίπτωση αυτή επομένως είναι αδύνατος ο διαμερισμός του χώρου σε επιμέρους απομονωμένες περιοχές όπως στην μονοδιάστατη περίπτωση όπου η κίνηση ενός σωματιδίου περιορίζεται από τα υπόλοιπα.

Η σχέση (1.5) καθιστά μια ένα προς ένα αντιστοιχία μεταξύ όλων των φερμιονικών και μποζονικών ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας. Αυτή η αντιστοιχία αφορά όλα τα μεγέθη τα οποία υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τα τετράγωνα των κυματοσυναρτήσεων αφού  $|\psi^B|^2 = |\psi^F|^2$  για  $|A|^2 = 1$ . Αντιθέτως οι κατανομές των ορμών θα διαφέρουν αρκετά αφού για τον υπολογισμό τους χρησιμοποιούμε τον μετασχηματισμό Fourier της κυματοσυνάρτησης και ο οποίος θα εξαρτάται από το πρόσημο της στην εκάστοτε επιμέρους περιοχή του διαμορφωμένου χώρου.

Κλείνοντας την ενότητα αυτή αξίζει να υπογραμμίσουμε τη σπουδαιότητα

αυτού του θεωρήματος η οποία έγκειται στο γεγονός ότι μας δίνει τη δυνατότητα να χειριζόμαστε συστήματα ισχυρά αλληλεπιδρώντων μποζονίων ως συστήματα ελεύθερων φερμιονίων το οποίο καθιστά τον υπολογισμό των κυματοσυναρτήσεων και των αντίστοιχων φυσικών ποσοτήτων πολύ πιο εύκολο.

## 4. Μοντέλο Lieb-Liniger

Η χαμιλτονιανή του μοντέλου Lieb-Liniger στην πρώτη κβάντωση έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2c \sum_{i < j}^N \delta(x_i - x_j) \quad (1.6)$$

όπου έχουμε θέσει  $\hbar = 2m = 1$ . Η συγκεκριμένη χαμιλτονιανή περιγράφει ένα σύστημα  $N$  μποζονίων εγκλωβισμένων σε κουτί μήκους  $L$ , τα οποία αλληλεπιδρούν σημειακά με δυναμικό δ-συνάρτησης, ενώ η ισχύς της αλληλεπίδρασης εκφράζεται μέσω της σταθεράς  $c = \frac{m \cdot g_{1D}}{\hbar^2}$ , την οποία θεωρούμε θετική,  $c \geq 0$ , δηλαδή οι αλληλεπιδράσεις είναι απωστικές. Η παραπάνω χαμιλτονιανή ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger

$$\mathcal{H}\psi = E\psi \quad (1.7)$$

όπου η κυματοσυνάρτηση  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$  του συστήματος είναι συμμετρική στην εναλλαγή των χωρικών συντεταγμένων δύο οποιονδήποτε σωματιδίων

$$\psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = \psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad (1.8)$$

ενώ επίσης ικανοποιεί και περιοδικές συνοριακές συνθήκες για κάθε μεταβλητή  $x_i$  στο διάστημα

$$R : \text{για όλα τα } 0 \leq x_i \leq L \quad (1.9)$$

Εξαιτίας της μορφής του δυναμικού αλληλεπίδρασης εισάγεται μια επιπλέον συνοριακή συνθήκη στο σύστημα η οποία εκφράζει την ασυνέχεια της πρώτης παραγώγου στα σημεία αλληλεπίδρασης δηλαδή εκεί όπου  $x_i = x_j$  και έχει την εξής μορφή

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \psi \Big|_{x_i=x_{j+}} - \left( \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi \Big|_{x_i=x_{j-}} = 2c \psi \Big|_{x_i=x_j} \quad (1.10)$$

ενώ αντιθέτως η κυματοσυνάρτηση εκεί είναι συνεχής. Οι δύο όροι στο αριστερό μέρος της προηγούμενης εξίσωσης είναι ισοδύναμοι, αφού έχουμε σύστημα μποζονίων πράγμα το οποίο σημαίνει συμμετρική κυματοσυνάρτηση.

Αν τώρα θεωρήσουμε μια διαμέριση του χώρου τέτοια ώστε

$$R_1 : 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq x_3 \leq \dots \leq x_N \quad (1.11)$$

τότε η γνώση της κυματοσυνάρτησης εκεί, συνεπάγεται για τον ίδιο λόγο με πριν και την γνώση της σε όλο το χώρο  $R$ . Υπάρχουν  $N!$  τέτοιες διαμερίσεις του χώρου, όσες είναι δηλαδή και οι μεταθέσεις των  $N$  μποζονίων που απαρτίζουν το σύστημα με την  $R_1$  να ονομάζεται συνήθως θεμελιώδης διαμέριση.

Όσον αφορά τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες θα πρέπει να γίνει η ερμηνεία τους στον χώρο  $R$  με όρους κυματοσυνάρτησης  $\psi$  η οποία είναι ορισμένη στον  $R_1$ . Έτσι λοιπόν η γενική συνθήκη γράφεται ως :

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(L, x_2, \dots, x_N) \quad (1.12)$$

Το όρισμα της συνάρτησης στο αριστερό σκέλος δεν είναι στο χώρο  $R$  αλλά εξ ορισμού μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi(L, x_2, \dots, x_N) = \psi(x_2, x_3, \dots, x_N, L) \quad (1.13)$$



Τελικά οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες που ικανοποιούν η κυματοσυνάρτηση και η πρώτη παράγωγος θα έχουν την εξής μορφή:

$$\psi(0, x_2, \dots, x_N) = \psi(x_2, x_3, \dots, x_N, L) \quad (1.14)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, x_2, \dots, x_N) \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial}{\partial x} \psi(x_2, x_3, \dots, x_N, x) \right|_{x=L} \quad (1.15)$$

Οι δύο αυτές εξισώσεις μαζί με την (1.10) καλύπτουν τις συνθήκες σε όλα τα σύνορα του χώρου  $R_1$ .

Υιοθετώντας την υπόθεση του Bethe (εξίσωση 1.1) οι Lieb και Liniger έγραψαν την κυματοσυνάρτηση του συστήματος ως μια υπέρθεση όλων των  $N!$  επίπεδων κυμάτων [7]

$$\psi_1(x_1, \dots, x_N) = \sum_{\mathcal{P}} A(\mathcal{P}) e^{i(k_{\mathcal{P}_1} \cdot x_1 + \dots + k_{\mathcal{P}_N} \cdot x_N)} \quad (1.16)$$

Η κυματοσυνάρτηση αυτή αντιστοιχεί στη θεμελιώδη διαμέριση  $R_1$  και ικανοποιεί την ελεύθερη εξίσωση Schrödinger εντός αυτής και την συνοριακή συνθήκη της ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου στα σημεία  $x_i = x_{i+1}$ . Οι σχέσεις που εκφράζουν αυτές τις δύο συνθήκες είναι :

$$-\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \psi_1 = E \psi_1 \quad (1.17)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial x_{i+1}} - \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \psi \Big|_{x_{i+1}=x_i} = c \psi \Big|_{x_{i+1}=x_i} \quad (1.18)$$

Η εξίσωση (1.17) ικανοποιείται από την σχέση  $\psi(x_i, \dots, x_N) = \mathcal{A} \prod_{i=1}^N e^{i(k_i \cdot x_i)}$ .

Οπότε η συνολική ορμή και ενέργεια του συστήματος των  $N$  μποζονίων θα είναι:

$$E = \sum_{i=1}^N k_i^2 \quad (1.19)$$

$$P = \sum_{i=1}^N k_i \quad (1.20)$$

Λαμβάνοντας υπόψη και την περίπτωση όπου  $x_i = x_j$  και χρησιμοποιώντας την εξίσωση ασυνέχειας (1.18) βρίσκουμε τις σχέσεις μεταξύ των συντελεστών  $A(\mathcal{P})$  της κυματοσυνάρτησης (1.16):

$$A(\mathcal{P}') = \frac{k_{\mathcal{P}_j} - k_{\mathcal{P}_{j+1}} + ic}{k_{\mathcal{P}_j} - k_{\mathcal{P}_{j+1}} - ic} A(\mathcal{P}) \Leftrightarrow A(\mathcal{P}') = e^{-i\theta(k_{\mathcal{P}_j} - k_{\mathcal{P}_{j+1}})} A(\mathcal{P}) \quad (1.21)$$

όπου  $\mathcal{P}'$  αντιστοιχεί σε μία μετάθεση που παίρνουμε με την ανταλλαγή των  $\mathcal{P}_j$  και  $\mathcal{P}_{j+1}$ , δηλαδή  $\mathcal{P}' = \{\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{P}_{j-1}, \mathcal{P}_{j+1}, \mathcal{P}_j, \dots, \mathcal{P}_N\}$ . Η σχέση (1.21) εκφράζει μια διαδικασία σκέδασης μεταξύ δύο οποιονδήποτε σωματιδίων η οποία οδηγεί σε μια αντισυμμετρική μετατόπιση φάσης όπου στην περίπτωση δύο σωματιδίων με ορμές  $k_\alpha$  και  $k_\beta$  δίνεται από την σχέση

$$\theta(k_\alpha - k_\beta) = 2 \cdot \arctan\left(\frac{k_\alpha - k_\beta}{c}\right) \quad (1.22)$$

Έτσι λοιπόν για ένα οποιοδήποτε σύνολο ορμών  $\{k_i\}$  η κυματοσυνάρτηση του συστήματος που ορίζεται από την σχέση (1.16) θα ικανοποιεί τις εξισώσεις (1.17) και (1.18) όταν οι συντελεστές ικανοποιούν την εξίσωση (1.21).

Είναι σημαντικό να υπογραμμίσουμε εδώ ότι όλες οι ορμες του συνόλου  $\{k_i\}$  θα πρέπει να είναι διαφορετικές μεταξύ τους αφού στην περίπτωση που υπάρχουν δύο ορμές ίδιες τότε ταυτοτικά η κυματοσυνάρτηση  $\psi_1$  μηδενίζεται.

## 4.1 Εξισώσεις Bethe

Από τις συνοριακές συνθήκες (1.14) και (1.15) του προβλήματος καταλήγουμε σε  $N$  εξισώσεις οι οποίες έχουν τη μορφή:

$$e^{ik_i L} = -e^{-i\alpha} \prod_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{k_i - k_j + ic}{k_i - k_j - ic}, \text{ για } i = 1, 2, \dots, N \quad (1.23)$$

και είναι γνωστές ως εξισώσεις Bethe. Όταν  $\alpha = \pi$  τότε η κυματοσυνάρτηση είναι αντι-περιοδική ενώ όταν  $\alpha = 0$  είναι περιοδική. Από τις εξισώσεις αυτές μπορούμε να προσδιορίσουμε τις επιτρεπόμενες τιμές των ορμών  $k_i$ .

Γράφοντας τις εξισώσεις (1.23) συναρτήσει της μετατόπισης φάσης  $\theta(k)$  και παίρνοντας τον λογάριθμο καταλήγουμε στην ακόλουθη εναλλακτική μορφή των εξισώσεων Bethe:

$$\frac{2\pi}{L} I_i = k_i + \frac{1}{L} \sum_j^N \theta\left(\frac{k_i - k_j}{c}\right) \quad (1.24)$$

οι οποίες γενικεύουν την γνωστή συνθήκη κβάντωσης των ελεύθερων σωματιδίων  $k_i = \frac{2\pi I_i}{L}$  όπου  $I_i$  ακέραιοι για περιττό αριθμό σωματιδίων και ημιακέραιοι για άρτιο. Ένα σύνολο  $\{k_i\}$  που λύνει τις εξισώσεις αυτές ονομάζεται συχνά ως ρίζες Bethe. Οι λύσεις των εξισώσεων Bethe μας δίνουν τις ιδιοκαταστάσεις και τις αντίστοιχες ιδιοενέργειες του περιοδικού συστήματος. Για την θεμελιώδη κατάσταση οι κβαντικοί αριθμοί  $I_i$  ικανοποιούν την σχέση  $I_{i+1} - I_i = 1$  για  $1 \leq i < N$  και  $I_1 = -I_N$

## 4.2 Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης

Στη θεμελιώδη κατάσταση ο ανταγωνισμός μεταξύ της κινητικής ενέργειας των μποζονίων και της ενέργειας αλληλεπίδρασης τους αναπαρίσταται στο μοντέλο Lieb-Liniger μέσω της αδιάστατης παραμέτρου  $\gamma = \frac{c}{\rho}$  όπου  $\rho = \frac{N}{L}$  είναι η πυκνότητα σωματιδίων η οποία στο θερμοδυναμικό όριο, δηλαδή όταν  $N, L \rightarrow \infty$ , είναι σταθερή. Στην περίπτωση όπου  $\gamma = 0$  τότε έχουμε ελεύθερα μποζόνια. Για  $\gamma \neq 0$  όλες οι ορμές είναι διαφορετικές ενώ όταν  $\gamma = \infty$  η ισχυρή αλληλεπίδραση κάνει την κατανομή ορμών να μοιάζει με αυτή των ελεύθερων φερμιονίων. Η τελευταία περίπτωση είναι γνωστή ως το όριο Tonks-Girardeau όπου παίρνουμε και το ομώνυμο αέριο μποζονίων. Επίσης στην περίπτωση αυτή, από το θεώρημα απεικόνισης μποζονίων σε φερμιόνια, μπορούμε να προσδιορίσουμε τις ιδιότητες της θεμελιώδους κατάστασης μέσω της κυματοσυνάρτησης των μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων.

Για σταθερή πυκνότητα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την αδιάστατη παράμετρο  $\gamma$  ως μεταβλητή συναρτήσεως της οποίας υπολογίζουμε την θεμελιώδη ενέργεια του συστήματος και η οποία δίνεται από τη σχέση :

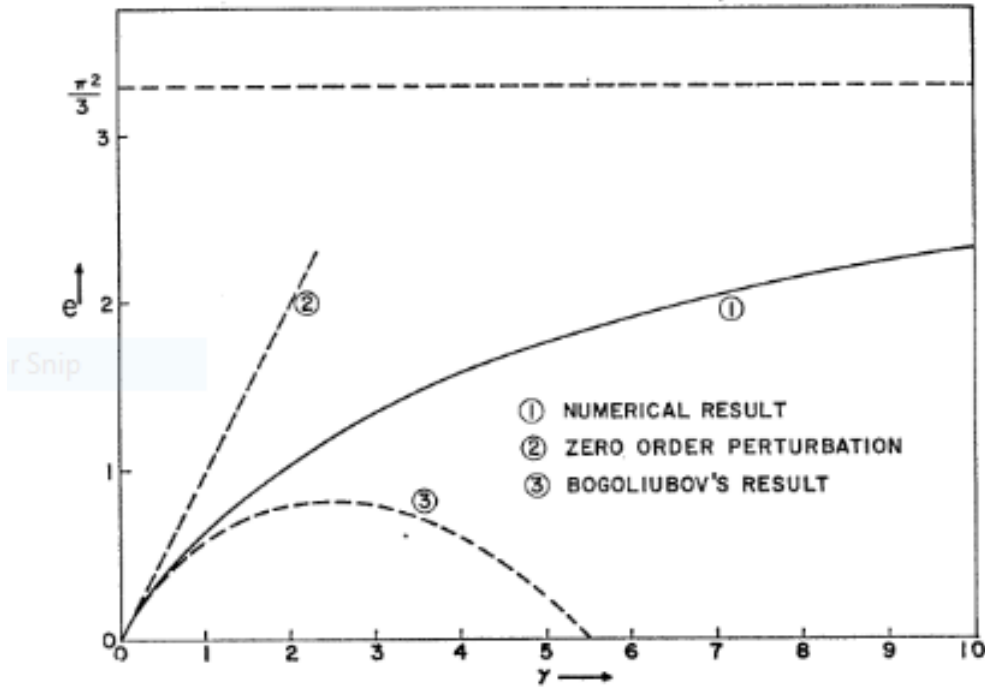
$$E_0 = N\rho^2 \cdot e(\gamma) \quad (1.25)$$

όπου η συνάρτηση  $e(\gamma)$  δίνεται από τη σχέση

$$e(\gamma) = \frac{\gamma^3}{c^3} \int_{-q}^{+q} k^2 \rho(k) dk \quad (1.26)$$

με  $\rho(k)$  την κατανομή ορμής. Η τελευταία λύνεται αριθμητικά ενώ για τις οριακές περιπτώσεις  $e(\gamma \rightarrow 0)$  παίρνουμε τα ελεύθερα σωματίδια και για  $e(\gamma \rightarrow \infty)$  έχουμε το αέριο Tonks-Girardeau όπου  $\rho(k) = \frac{1}{2\pi}$ ,  $q = k_F$  και  $\rho = \frac{k_F}{\pi}$  οπότε

**Σχήμα 1.1:** Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης συναρτήσει της σταθεράς αλληλεπίδρασης  $\gamma$



Στο διάγραμμα αυτό φαίνεται ξεκάθαρα ότι καθώς  $\gamma \rightarrow \infty$  τότε  $e \rightarrow \frac{\pi^2}{3}$ . Η καμπύλη (1) δίνει την αριθμητική λύση της  $e(\gamma)$ . Η καμπύλη (2) είναι το αποτέλεσμα σε μηδενική τάξη της θεωρίας διαταραχών, δηλαδή η αναμενόμενη τιμή του δυναμικού στη θεμελιώδη κατάσταση χωρίς αλληλεπίδραση ενώ η καμπύλη (3) είναι το αποτέλεσμα της διαταρακτικής θεωρίας του Bogoliubov όπου φαίνεται να δίνει καλά αποτελέσματα μέχρι  $\gamma \approx 2$ .

τελικά

$$e(\gamma \rightarrow \infty) = \frac{\gamma^3}{c^3} \int_{-q}^{+q} k^2 \rho(k) dk = \frac{1}{\pi \rho^3} \frac{k_F^3}{3} = \frac{\pi^2}{3} \quad (1.27)$$

Στο παρακάτω διάγραμμα δίνεται η αριθμητική λύση της  $e_0(\gamma) = \frac{E_0}{N\rho^2}$  καθώς επίσης και η διαταρακτική προσέγγιση [7].

## Κεφάλαιο 2

---

### Μελέτη συστήματος δύο αλληλεπιδρώντων μποζονίων

---

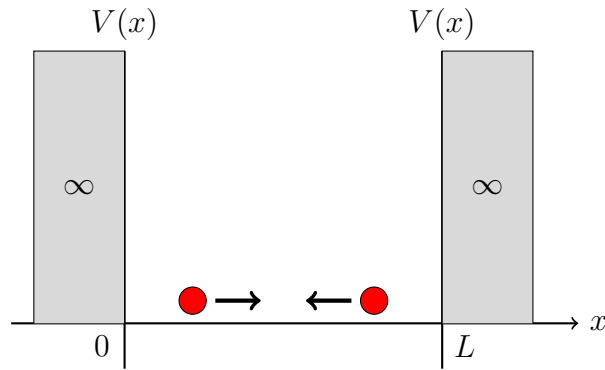
#### 1. Χαμιλτονιανή

Στο παρόν κεφάλαιο, όπως μαρτυρά και ο τίτλος του, θα γίνει η αναλυτική μελέτη ενός συστήματος δύο αλληλεπιδρώντων σωματιδίων χρησιμοποιώντας τις έννοιες και τον μαθηματικό φορμαλισμό που αναπτύχθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο στο πλαίσιο της θεωρίας των συστημάτων πολλών σωματιδίων. Η αναπαράσταση του εν λόγω συστήματος δίνεται από το σχήμα 2.1 όπου για το εξωτερικό δυναμικό το οποίο ‘αισθάνονται’ τα σωματίδια ισχύει:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{όταν } (x_1, x_2) \in [0, L] \\ \infty & \text{όταν } (x_1, x_2) \notin [0, L] \end{cases} \quad (2.1)$$

ενώ η χαμιλτονιανή του είναι η ακόλουθη:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + g_{1d} \delta(x_1 - x_2) + V(x_1) + V(x_2) \quad (2.2)$$



Σχήμα 2.1: Δύο αλληλεπιδρώντα σωματίδια σε απειρόβαθο πηγάδι

η οποία ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger

$$\mathcal{H}\psi(x_1, x_2) = E_{n_1, n_2}\psi(x_1, x_2) \quad (2.3)$$

με  $\psi(x_1, x_2)$  και  $E_{n_1, n_2}$  να είναι η κυματοσυνάρτηση και η ενέργεια του συστήματος αντίστοιχα.

Η συγκεκριμένη χαμιλτονιανή περιγράφει δύο ταυτόσημα σωματίδια τα οποία κινούνται μέσα σε ένα μονοδιάστατο κουτί μήκους  $L$  (2.1) και αλληλεπιδρούν σημειακά μέσω δ-συνάρτησης. Η ισχύς της αλληλεπίδρασης εκφράζεται μέσω της παραμέτρου  $g_{1d}$  ενώ επίσης θεωρούμε ότι  $g_{1d} > 0$  δηλαδή πρόκειται για απωστικές αλληλεπιδράσεις. Η βασική διαφορά του μοντέλου αυτού σε σχέση με τα αντίστοιχα του πρώτου κεφαλαίου έγκειται στο γεγονός ότι τώρα οι συνοριακές συνθήκες είναι τύπου σκληρών τοιχωμάτων και όχι περιοδικές θέτοντας έτσι διαφορετικούς περιορισμούς στον προσδιορισμό της κυματοσυνάρτησης του.

## 2. Προσδιορισμός συνοριακών συνθηκών

Για την μελέτη οποιουδήποτε φυσικού συστήματος, κλασικού ή κβαντικού, σημαντικό ρόλο παίζουν οι συνοριακές συνθήκες οι οποίες και καθορίζουν την τελική

μορφή των λύσεων. Το συγκεκριμένο πρόβλημα μπορεί να μελετηθεί είτε χρησιμοποιώντας το σύστημα συντεταγμένων θέσης  $(x_1, x_2)$  των δύο σωματιδίων είτε το σύστημα συντεταγμένων του κέντρου μάζας και της σχετικής τους θέσης δηλαδή δύο νέες μεταβλητές  $(\eta, \xi)$  αντίστοιχα.

Όσον αφορά την κυματοσυνάρτηση του συστήματος, λαμβάνοντας υπόψη την υπόθεση του Bethe και την εξίσωση (1.1), αυτή θα έχει την ακόλουθη μορφή

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_2) \sim & e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + \\ & + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} \end{aligned} \quad (2.4)$$

η οποία προκύπτει από όλους τους συνδυασμούς των θέσεων και των ορμών των σωματιδίων.

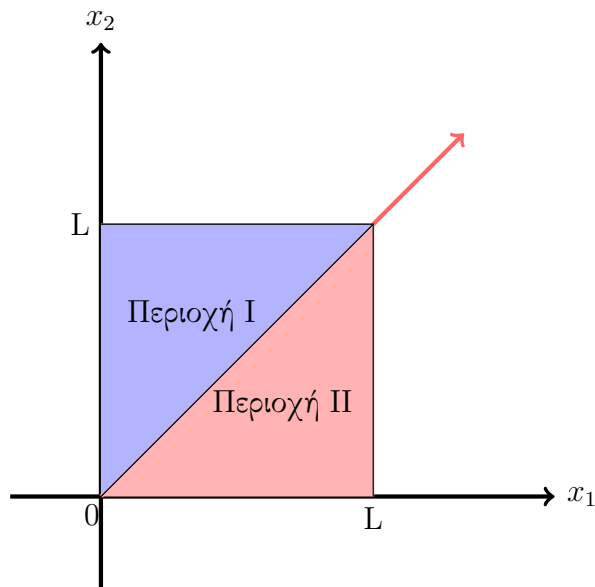
## 2.1 Σύστημα συντεταγμένων θέσης

Αν θεωρήσουμε ότι οι θέσεις των δύο σωματιδίων, έστω με δείκτες 1 και 2, στο χώρο  $[0, L]$  είναι  $x_1$  και  $x_2$ , τότε λόγω του γεγονότος ότι τα σωματίδια είναι μη διακρίσιμα δεν μπορούμε να γνωρίζουμε εκ των προτέρων ποιο από τα δύο, το 1 ή το 2, βρίσκεται στις θέσεις  $x_1$  ή  $x_2$ . Η αδυναμία αυτή προσδιορισμού της ακριβούς θέσης μας αναγκάζει να διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

- ▶ περίπτωση όπου  $x_1 < x_2$
- ▶ περίπτωση όπου  $x_1 > x_2$

οι οποίες ουσιαστικά διαμερίζουν το χώρο σε δύο περιοχές, σε κάθε μια από τις οποίες θα πρέπει να ικανοποιείται και η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση. Παραστατικά ο διαχωρισμός αυτός δίνεται στο σχήμα 2.2. από το οποίο βλέπουμε ότι υπάρχουν οι ακόλουθες συνθήκες:





Σχήμα 2.2: Σύστημα συντεταγμένων  $x_1, x_2$

► περιοχή I : όπου  $x_1 < x_2$  με

$$\text{Σ.Σ.} \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = L \end{cases} \quad (2.5)$$

► περιοχή II : όπου  $x_1 > x_2$  με

$$\text{Σ.Σ.} \begin{cases} x_1 = L \\ x_2 = 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

Επιπλέον η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει εν γένει να είναι διαφορετική σε κάθε περιοχή αλλά θα έχει τη μορφή της σχέσης (2.4). Θα έχουμε επομένως μια κυματοσυνάρτηση σε κλάδους η οποία για τις δύο επιμέρους περιοχές θα είναι η

ακόλουθη:

$$\begin{aligned}\psi_1(x_1, x_2) = & A_1 e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + A_2 e^{i(x_1 k_2 + x_2 k_1)} + \\ & A_3 e^{i(-x_1 k_1 + x_2 k_2)} + A_4 e^{i(-x_1 k_2 + x_2 k_1)} + \\ & + A_5 e^{i(x_1 k_1 - x_2 k_2)} + A_6 e^{i(x_1 k_2 - x_2 k_1)} + \\ & A_7 e^{i(-x_1 k_1 - x_2 k_2)} + A_8 e^{i(-x_1 k_2 - x_2 k_1)}\end{aligned}\quad (2.7)$$

$$\begin{aligned}\psi_2(x_1, x_2) = & B_1 e^{i(x_1 k_1 + x_2 k_2)} + B_2 e^{i(x_1 k_2 + x_2 k_1)} + \\ & B_3 e^{i(-x_1 k_1 + x_2 k_2)} + B_4 e^{i(-x_1 k_2 + x_2 k_1)} + \\ & + B_5 e^{i(x_1 k_1 - x_2 k_2)} + B_6 e^{i(x_1 k_2 - x_2 k_1)} + \\ & B_7 e^{i(-x_1 k_1 - x_2 k_2)} + B_8 e^{i(-x_1 k_2 - x_2 k_1)}\end{aligned}\quad (2.8)$$

με κατάλληλα  $A_i, B_i$  ( $i = 1, \dots, 8$ ) και  $k_1, k_2$ , όπου η  $\psi_1(x_1, x_2)$  αντιστοιχεί στην περιοχή I ( $x_1 < x_2$ ) και η  $\psi_2(x_1, x_2)$  στην περιοχή II ( $x_1 > x_2$ ).

Εκτός από τις δύο προαναφερθείσες περιοχές, υπάρχει και το σύνορο μεταξύ των δύο περιοχών που αντιστοιχεί στην περίπτωση όπου  $x_1 = x_2$  και εισάγει δύο νέες συνοριακές συνθήκες, την συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και την ασυνέχεια της πρώτης παραγώγου της, λόγω της μορφής του δυναμικού στα σημεία αυτά. Η ασυνέχεια της πρώτης παραγώγου θα έχει ακριβώς την ίδια μορφή όπως στη σχέση (1.10) και επομένως οι δύο συνοριακές συνθήκες θα έχουν την εξής μορφή:

$$\psi_1(x_1, x_2) \Big|_{x_1=x_2} = \psi_2(x_1, x_2) \Big|_{x_1=x_2} \quad (2.9)$$

$$\left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1 > x_2} - \left( \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) \Big|_{x_1 < x_2} = 2 \underbrace{\left( \frac{2mg}{\hbar^2} \right)}_c \cdot \psi \Big|_{x_1=x_2} \quad (2.10)$$

## 2.2 Σύστημα κέντρου μάζας

Εκτός από τις συντεταγμένες  $x_1, x_2$  μπορούμε να εργαστούμε στο σύστημα του κέντρου μάζας (Center of Mass (CoM)) του συστήματος των δύο σωματιδίων ορίζοντας τις εξής δύο νέες μεταβλητές ( $\eta, \xi$ ):

$$\xi = x_1 - x_2 \quad (2.11)$$

$$\eta = \frac{mx_1 + mx_2}{m + m} = \frac{1}{2}(x_1 + x_2) \quad (2.12)$$

όπου η πρώτη μας δίνει τη σχετική θέση των δύο σωματιδίων και η δεύτερη τη θέση του κέντρου μάζας του συστήματος. Άμεση συνέπεια των νέων συντεταγμένων είναι και ο ορισμός δύο νέων μεταβλητών για την ορμή ως εξής:

$$K = k_1 + k_2 \quad (2.13)$$

$$k = \frac{k_1 - k_2}{2} \quad (2.14)$$

οι οποίες αναπαριστούν τη συνολική ορμή και την ορμή του κέντρου μάζας αντίστοιχα.

Χρησιμοποιώντας τώρα όλες τις νέες αυτές μεταβλητές θα έχουμε μεταβολή τόσο στη μορφή που θα έχει η Χαμιλτονιανή του συστήματος όσο και στις συνοριακές συνθήκες που θα πρέπει να ικανοποιούνται. Για τον προσδιορισμό της νέας χαμιλτονιανής θα πρέπει να βρούμε τις δεύτερες παραγώγους στις νέες συντεταγμένες:

Από τις σχέσεις (2.11) και (2.12), λύνοντας ως προς τα  $x_1, x_2$ , παίρνουμε  $x_1 = \eta + \frac{\xi}{2}$  και  $x_2 = \eta - \frac{\xi}{2}$  και εκτελούμε τις μερικές παραγωγίσεις ως προς τις

νέες συντεταγμένες. Για την σχετική θέση των δύο σωματιδίων έχουμε:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \xi} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{1}{4} \left( \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = \frac{1}{4} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \quad (2.16)$$

Αντίστοιχα για το κέντρο μάζας θα έχουμε:

$$\frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} = \left( \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \quad (2.18)$$

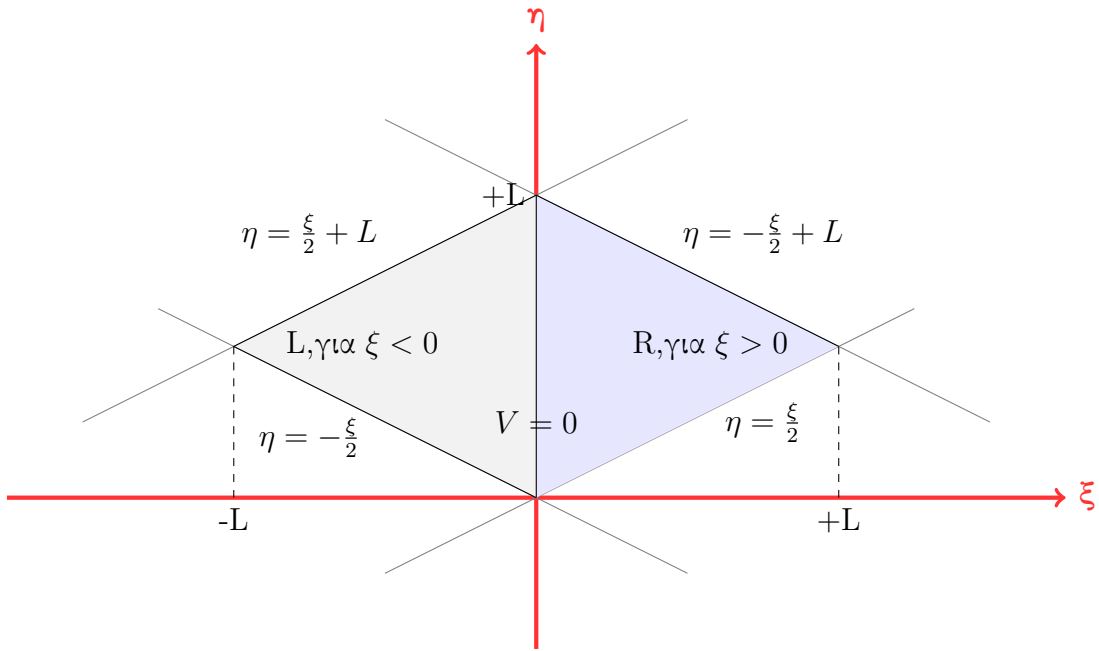
Συνδυάζοντας τώρα τις εξισώσεις (2.16) και (2.18) παίρνουμε τους κινητικούς όρους στο νέο σύστημα αναφοράς

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \quad (2.19)$$

Από τις εξισώσεις (2.11), (2.12) (2.19) και (2.3) παίρνουμε την χαμιλτονιανή στις νέες συντεταγμένες:

$$\boxed{\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + V(\eta + \frac{\xi}{2}) + V(\eta - \frac{\xi}{2}) + g_{1d} \delta(\xi)} \quad (2.20)$$

Οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος παίρνουν τώρα το σχήμα ρόμβου και παρουσιάζονται παραστατικά στο σχήμα (2.3). Το εξωτερικό δυναμικό είναι μηδέν εντός του ρόμβου και άπειρο εκτός. Η ασυνέχεια στο  $\xi = 0$  λόγω της δ-συνάρτησης που εμφανίζεται στην χαμιλτονιανή (2.20) έχει σαν αποτέλεσμα τον διαμερισμό του χώρου σε δύο πάλι περιοχές, την αριστερή και την δεξιά (L, R στο σχήμα αντίστοιχα). Έτσι και σε αυτές τις μεταβλητές θα έχουμε πάλι



Σχήμα 2.3: Σύστημα κέντρου μάζας και σχετικής θέσης

κυματοσυνάρτηση σε κλάδους για το σύστημα η οποία παίρνει τη μορφή :

$$\begin{aligned}
 \psi_{K,k}(|\xi|, \eta) = & c_1 e^{i(k|\xi|+K\eta)} + c_2 e^{i(k|\xi|-K\eta)} \\
 & + c_3 e^{i(-k|\xi|+K\eta)} + c_4 e^{i(-k|\xi|-K\eta)} \\
 & + c_5 e^{i(\frac{K}{2}|\xi|+2k\eta)} + c_6 e^{i(\frac{K}{2}|\xi|-2k\eta)} \\
 & + c_7 e^{i(-\frac{K}{2}|\xi|+2k\eta)} + c_8 e^{i(-\frac{K}{2}|\xi|-2k\eta)}
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

με κατάλληλα  $c_i$  ( $i = 1, \dots, 8$ ) και  $k, K$  και η οποία ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger στις νέες συντεταγμένες

$$\mathcal{H}(k, K) \cdot \psi_{k,K}(\eta, \xi) = E_{k,K} \cdot \psi_{k,K}(\eta, \xi) \tag{2.22}$$

Οι συνοριακές συνθήκες οι οποίες θα πρέπει να ικανοποιούνται στο δια-

χωριστικό όριο  $\xi = 0$  είναι οι ακόλουθες:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right|_{\xi=0^+} - \left. \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right|_{\xi=0^-} = 2 \underbrace{\left( \frac{2mg}{\hbar^2} \right)}_c \cdot \psi \Big|_{x_1=x_2} \quad (2.23)$$

$$\psi_L(|\xi|, \eta) \Big|_{\xi=0^-} = \psi_R(|\xi|, \eta) \Big|_{\xi=0^+} \quad (2.24)$$

### 3. Προσδιορισμός κυματοσυνάρτησης

Έχοντας προσδιορίσει στο προηγούμενο κεφάλαιο τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος θα βρούμε αναλυτικά την μορφή της κυματοσυνάρτησης του συστήματος των δύο σωματιδίων μέσω της εφαρμογής της ικανοποίησης των συνθηκών αυτών. Αρχικά θα χρησιμοποιηθεί το σύστημα συντεταγμένων θέσης, ενώ όπου υπάρχει ανάγκη για λόγους απλοποίησης των σχέσεων θα χρησιμοποιηθούν και μεταβλητές του κέντρου μάζας.

Αρχίζοντας από την απαίτηση μηδενισμού της κυματοσυνάρτησης στα άκρα του κουτιού, θα χρησιμοποιήσουμε τις συνθήκες (2.6) και (;;) στις κυματοσυναρτήσεις των περιοχών I και II. Για την περιοχή I θα έχουμε:

$$\begin{aligned} \psi_{(I)}(x_1, x_2) \Big|_{x_1=0} = 0 &\rightarrow A_1 = -A_3, A_2 = -A_4, \\ A_5 = -A_7, A_6 = -A_8 \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\psi_{(I)}(x_1, x_2) \Big|_{x_2=L} = 0 \rightarrow A_5 = -A_1 e^{i2k_2 L}, A_6 = -A_2 e^{i2k_1 L} \quad (2.26)$$

Αντίστοιχα για την περιοχή II θα πάρουμε τις ακόλουθες συνθήκες:

$$\begin{aligned} \psi_{(II)}(x_1, x_2) \Big|_{x_2=0} = 0 &\rightarrow B_1 = -B_5, B_2 = -B_6, \\ B_3 = -B_7, B_4 = -B_8 \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\psi_{(II)}(x_1, x_2) \Big|_{x_1=L} = 0 \rightarrow B_3 = -B_1 e^{i2k_1 L}, B_4 = -B_2 e^{i2k_2 L} \quad (2.28)$$

Από την απαίτηση συνέχειας των κυματοσυναρτήσεων στο  $x_1 = x_2 = x$  θα πάρουμε δύο ακόμα σχέσεις για τους συντελεστές A και B:

$$\psi_{(I)}(x_1, x_2) \Big|_{x_1=x_2=x} = \psi_{(II)}(x_1, x_2) \Big|_{x_1=x_2=x} \Rightarrow \boxed{A_1 = B_2}, \boxed{A_2 = B_1} \quad (2.29)$$

Τελικά, μετά τον προσδιορισμό των σχέσεων μεταξύ των συντελεστών  $A_i$  και  $B_i$  οι κυματοσυναρτήσεις του συστήματος παίρνουν την παρακάτω απλούστερη μορφή:

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1, x_2) = A_1 \cdot 2i \sin(k_1 x_1) \{ e^{ik_2 x_2} - e^{i2k_2 L} e^{-ik_2 x_2} \} \\ A_2 \cdot 2i \sin(k_2 x_1) \{ e^{ik_1 x_2} - e^{i2k_1 L} e^{-ik_1 x_2} \} \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x_1, x_2) = A_2 \cdot 2i \sin(k_2 x_2) \{ e^{ik_1 x_1} - e^{i2k_1 L} e^{-ik_1 x_1} \} \\ A_1 \cdot 2i \sin(k_1 x_2) \{ e^{ik_2 x_1} - e^{i2k_2 L} e^{-ik_2 x_1} \} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Η τελευταία συνθήκη που θα πρέπει να ικανοποιείται είναι αυτή της ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου των δύο παραπάνω κυματοσυναρτήσεων και δίνεται από τη σχέση (2.10). Αυτό οδηγεί στο ακόλουθο σύστημα εξισώσεων :

1.  $A_2(i2k) - A_1(i2k) - A_1(i2k + 2c) + A_2(i2k - 2c) = 0$
2.  $A_1(iKe^{i(K-2k)L}) - A_2(iK) + A_1((iK + 2c)e^{i(K-2k)L}) - A_2(iK - 2c) = 0$
3.  $A_2(iKe^{i(K+2k)L}) - A_1(iK) - A_1(iK - 2c) + A_2((iK + 2c)e^{i(K+2k)L}) = 0$
4.  $A_1(i2ke^{i(K-2k)L}) - A_2(i2ke^{i(K+2k)L}) + A_1((i2k - 2c)e^{i(K-2k)L}) - A_2((i2k + 2c)e^{i(K+2k)L}) = 0$

Οι τέσσερις παραπάνω εξισώσεις είναι γραμμένες για λόγους συμβολισμού στις μεταβλητές  $(k, K)$  του συστήματος του κέντρου μάζας. Λύνοντας όλες τις εξισώσεις ως πριν τον λόγο  $\frac{A_1}{A_2}$  παίρνουμε τις ακόλουθες τέσσερις σχέσεις:

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{2k + ic}{2k - ic} \quad (2.32)$$

$$\frac{A_1}{A_2} = e^{-i(K-2k)L} \frac{K + ic}{K - ic} \quad (2.33)$$

$$\frac{A_1}{A_2} = e^{i(K+2k)L} \frac{K - ic}{K + ic} \quad (2.34)$$

$$\frac{A_1}{A_2} = e^{i4kL} \frac{2k - ic}{2k + ic} \quad (2.35)$$

Αν και εκ πρώτης όψης το παραπάνω σύστημα φαίνεται να μην έχει λύση, εντούτοις λύση υπάρχει και είναι τέτοια ώστε να ικανοποιεί τις τέσσερις προηγούμενες εξισώσεις. Αν και ο αριθμός των εξισώσεων είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των αγνώστων, υπάρχει λύση στο σύστημα αυτό όταν ικανοποιούνται οι



δύο ακόλουθες σχέσεις:

$$\boxed{e^{i2kL} = \frac{2k + ic}{2k - ic}} \quad (2.36)$$

$$\boxed{e^{iKL} = \frac{K + ic}{K - ic}} \quad (2.37)$$

Οι δύο αυτές σχέσεις μπορούν να γραφτούν διαφορετικά χρησιμοποιώντας την σχέση του Euler  $z = |z|e^{i\theta}$  με  $\theta = \text{Arg}(z) = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) + n\pi$ , οπότε

$$e^{i2kL} = \frac{2k + ic}{2k - ic} = \frac{|z_k|e^{i\theta_k}}{|z_k|e^{-i\theta_k}} = e^{i2\theta_k} \quad (2.38)$$

$$e^{iKL} = \frac{K + ic}{K - ic} = \frac{|z_K|e^{i\theta_K}}{|z_K|e^{-i\theta_K}} = e^{i2\theta_K} \quad (2.39)$$

και τελικά οι εξισώσεις για τις μεταβλητές  $(k, K)$  είναι οι ακόλουθες:

$$K = \frac{2n\pi}{L} + \frac{2}{L} \cdot \arctan\left(\frac{c}{K}\right), n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.40)$$

$$k = \frac{m\pi}{L} + \frac{1}{L} \cdot \arctan\left(\frac{c}{2k}\right), m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.41)$$

Οι εξισώσεις αυτές επιδέχονται μόνο αριθμητική λύση και αποτελούν τις βασικές σχέσεις μέσω των οποίων θα υπολογιστούν οι ορμές  $k_1, k_2$  των δύο σωματιδίων και κατ' επέκταση και όλες οι φυσικές ποσότητες που αφορούν το σύστημα. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.13), (2.14) οι ορμές αυτές είναι

$$\boxed{k_1 = \frac{K}{2} + k} \quad \text{και} \quad \boxed{k_2 = \frac{K}{2} - k}$$

Τέλος, συνδυάζοντας τις σχέσεις (2.32), (2.36) και (2.14) για τον προσδιορισμό συντελεστών  $A_1, A_2$  και αντικαθιστώντας στις κυματοσυναρτήσεις (2.30) και (2.31) παίρνουμε την αναλυτική έκφραση :

$$\begin{aligned} \psi_I(x_1, x_2) = & -4A_1 e^{i2k_2 L} [\sin(k_1 x_1) \cdot \sin(k_2(x_2 - L)) + \\ & + \sin(k_2 x_1) \cdot \sin(k_1(x_2 - L))] \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x_1, x_2) = & -4A_1 e^{i2k_2 L} [\sin(k_2 x_2) \cdot \sin(k_1(x_1 - L)) + \\ & + \sin(k_1 x_2) \cdot \sin(k_2(x_1 - L))] \end{aligned} \quad (2.43)$$

Η σταθερά  $A_1$  προσδιορίζεται από τη συνθήκη κανονικοποίησης της κυματοσυνάρτησης

$$\int_0^L \cdot \int_0^L dx_1 dx_2 \psi(x_1, x_2) \psi^*(x_1, x_2) = 1 \quad (2.44)$$

και ισούται με

$$|A_1|^2 = \frac{1}{8 \left( L^2 - \frac{L \sin(2k_1 L)}{2k_1} - \frac{L \sin(2k_2 L)}{2k_2} + \frac{\sin(2k_1 L) \cdot \sin(2k_2 L)}{4k_1 k_2} \right)} \quad (2.45)$$

Όσον αφορά την ενέργεια του συστήματος, αυτή προκύπτει από την δράση της χαμιλτονιανής (2.2) πάνω στις κυματοσυναρτήσεις (2.42) και (2.43) του συστήματος και δίνεται από την ακόλουθη σχέση :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot \frac{L^2}{\pi^2} \left( \frac{K^2}{2} + 2k^2 \right) \quad (2.46)$$

## Κεφάλαιο 3

---

### Υπολογισμός φυσικών μεγεθών

---

Στο προηγούμενο κεφάλαιο υπολογίσαμε την αναλυτική μορφή που έχει η κυματοσυνάρτηση του συστήματος των δύο αλληλεπιδρώντων σωματιδίων καθώς επίσης και τις σχέσεις οι οποίες πρέπει να ικανοποιούνται έτσι ώστε να έχει λύση το συγκεκριμένο πρόβλημα (σχέσεις 2.40 και 2.41). Οι εξισώσεις αυτές επιδέχονται αριθμητική επίλυση και μας δίνουν τις τιμές για τις ψευδο-ορμές των σωματιδίων  $(k_1, k_2)$  ή ισοδύναμα  $(k, K)$  τις οποίες και θα χρησιμοποιήσουμε για να προσδιορίσουμε τα φυσικά μεγέθη του συστήματος όπως το ενεργειακό φάσμα, την κατανομή των ορμών, ο πίνακας πυκνότητας κ.λ.π.

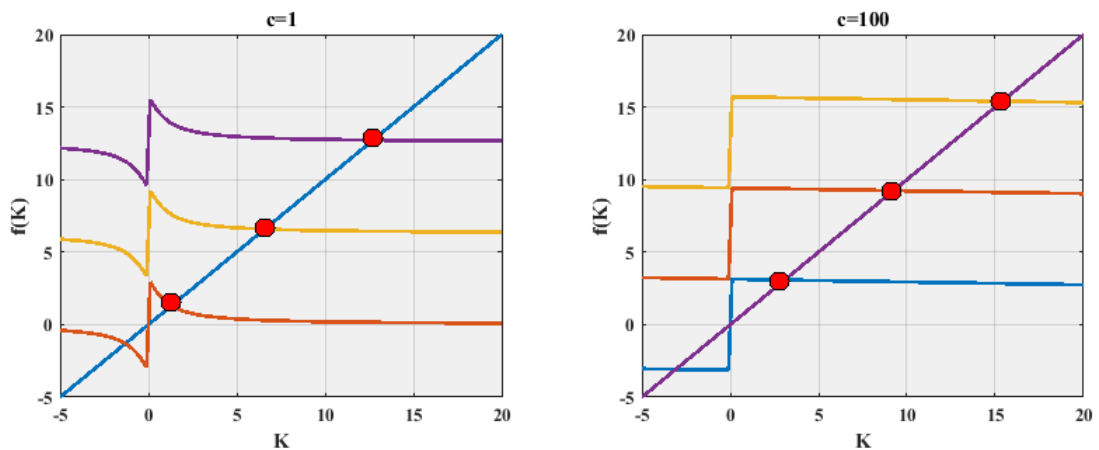
#### 1. Αριθμητική επίλυση εξισώσεων

Οι εξισώσεις (2.40) και (2.41) βλέπουμε ότι εξαρτώνται άμεσα από την σταθερά  $c > 0$  η οποία και χαρακτηρίζει την ισχύ της αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Επομένως για διάφορες τιμές της  $c$  θα υπάρχουν και διαφορετικές τιμές για τις ψευδο-ορμές των δύο σωματιδίων. Έτσι λοιπόν η κυματοσυνάρτηση του συστήματος, η οποία είναι μια συνάρτηση των θέσεων  $x_1, x_2$  και των ορμών

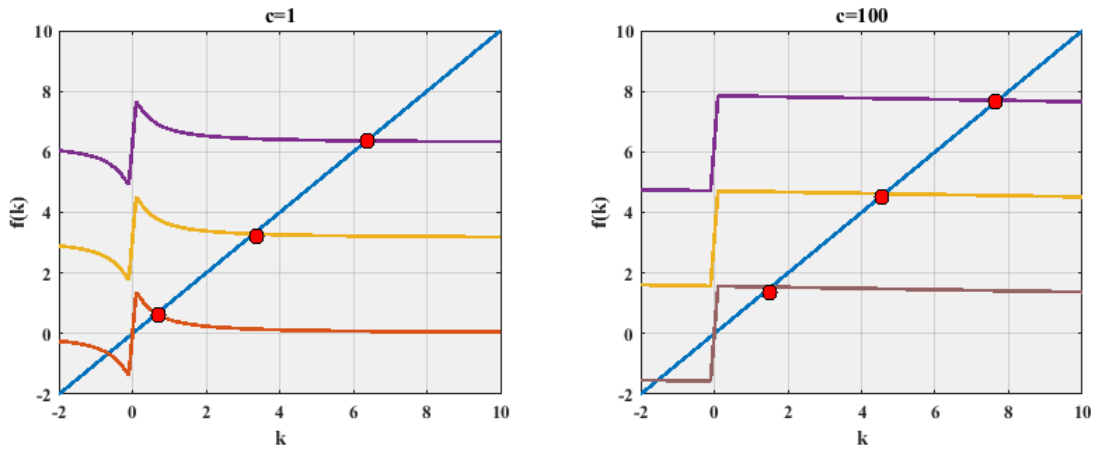
$k_1, k_2$ , θα εξαρτάται έμμεσα από την  $c$  και θα διαφοροποιείται για διάφορες τιμές της.

Η γραφική αναπαράσταση των δύο παραπάνω εξισώσεων για ενδεικτικές τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης δίνεται στα διαγράμματα 3.1 και 3.2. Συγκεκριμένα στο 3.1 έχουν σχεδιαστεί οι γραφικές παραστάσεις  $f(K) = K$  και  $f(K) = 2\pi n + 2 \operatorname{atan}\left(\frac{c}{K}\right)$  και στο 3.2 οι  $f(k) = k$  και  $f(k) = \pi m + \operatorname{atan}\left(\frac{c}{2k}\right)$  για τιμές των  $n, m = 0, 1, 2$  ενώ έχουμε θεωρήσει ότι  $L = 1$ . Τα σημεία τομής των προηγούμενων εξισώσεων (κόκκινες τελείες στα σχήματα) μας δίνουν τις τιμές των  $(k, K)$ .

Σχήμα 3.1: Αριθμητικός προσδιορισμός του  $K$



Σχήμα 3.2: Αριθμητικός προσδιορισμός του  $k$



Στον πίνακα 3.1 παρατίθενται ενδεικτικά οι τιμές των  $K, k$  που αντιστοιχούν στα δύο διαγράμματα όπου η σταθερά αλληλεπίδρασης είναι  $c = 1, c = 100$  και  $n, m = 0, 1, 2, 3$ .

$c = 1$			$c = 100$		
$n/m$	$K(n)$	$k(m)$	$n/m$	$K(n)$	$k(m)$
0	1.307	0.653	0	3.308	1.54
1	6.585	3.292	1	9.24	4.62
2	12.723	6.362	2	15.402	7.701
3	18.955	9.477	3	21.566	10.783

Πίνακας 3.1: Πίνακας τιμών των μεταβλητών  $K, k$  για τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης  $c = 1$  και  $c = 100$

## 2. Μελέτη κβαντικών συσχετίσεων

Από την προηγούμενη παράγραφο έγινε σαφές ότι οι λύσεις του συστήματος προσδιορίζονται αριθμητικά και είναι οι τιμές που παίρνουν οι μεταβλητές  $K, k$  μέσω των οποίων υπολογίζονται και οι ορμές των σωματιδίων χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.13) και (2.14). Έτσι λοιπόν μπορούν να υπολογιστούν διάφορα φυσικά μεγέθη του συστήματος και οι κβαντικές συσχετίσεις που περιέχονται σε αυτά. Η μελέτη της συμπεριφοράς του συστήματος θα γίνει συναρτήσει της μεταβολής της σταθεράς αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο σωματιδίων με οριακές περιπτώσεις τις  $c \rightarrow 0$  και  $c \rightarrow \infty$  οι οποίες εκφράζουν το ελεύθερο σύστημα και το μη διαπερατό όριο ή όριο Tonks- Girardeau το οποίο ορίστηκε και στο Κεφάλαιο 2.

### 2.1 Ενεργειακό φάσμα

Για τον προσδιορισμό του ενεργειακού φάσματος θα χρησιμοποιήσουμε τιμές των  $K, k$  που προκύπτουν αριθμητικά και οι οποίες πρέπει να ικανοποιούν την απαίτηση  $K \neq 2k$  (ή  $K \neq -2k$ ) η οποία συνεπάγεται και  $n \neq m$ . Για διάφορες τιμές της σταθεράς  $c$  παίρνουμε και διαφορετικό ενεργειακό φάσμα το οποίο όμως είναι πάντοτε διάκριτο αφού πρόκειται για ένα δέσμιο σύστημα.

Για τιμές της  $c = 5, 0.1, 0$  οι αριθμητικές λύσεις που προκύπτουν για τις μεταβλητές του κέντρου μάζας και της συνολικής ορμής δίνονται στον πίνακα 3.2.

c = 0, 1			c = 5		
n/m	K(n)	k(m)	n/m	K(n)	k(m)
0	0.444	0.222	0	2.2848	1.142
1	6.315	3.157	1	7.464	3.732
2	12.582	6.291	2	13.286	6.643
3	18.86	9.43	3	19.355	9.678
4	25.141	12.57	4	25.52	12.76

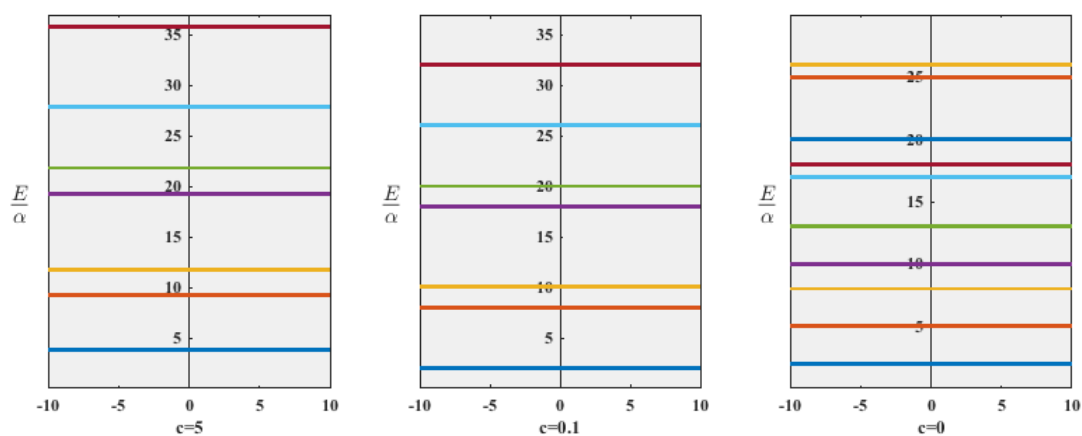
**Πίνακας 3.2:** Πίνακας τιμών των μεταβλητών  $K, k$  για  $c = 0.1$  και  $c = 5$

Από τις τιμές του πίνακα αυτού, παίρνοντας διάφορους συνδυασμούς των  $K$  και  $k$  μπορούμε, μέσω της σχέσης (2.46), να προσδιορίσουμε το ενεργειακό φάσμα του συστήματος το οποίο δίνεται στο διάγραμμα 3.3. Στο διάγραμμα αυτό η περίπτωση  $c = 0$  αντιστοιχεί στην περίπτωση όπου τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν ενώ η παράμετρος  $\alpha$  ισούται με  $\alpha = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$  όπου έχουμε θέσει  $L = 1$ . Στο διάγραμμα αυτό βλέπουμε ότι καθώς η ισχύς της αλληλεπίδρασης αυξάνεται, αυξάνονται ταυτόχρονα και οι ενέργειες της κάθε κατάστασης ενώ για  $c \rightarrow 0$  τείνουν να προσεγγίσουν τις ενέργειες του ελεύθερου συστήματος.

## 2.2 Ενέργεια του συστήματος

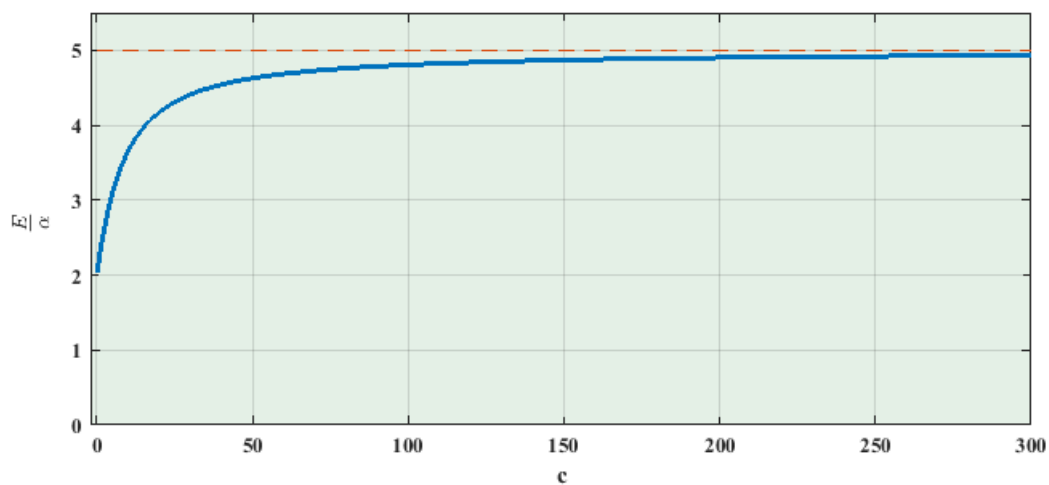
Εκτός από το ενεργειακό φάσμα, πολύ χρήσιμο στην μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς του συστήματος είναι ο προσδιορισμός της εξέλιξης της θεμελιώδους και πρώτης διεγερμένης κατάστασης συναρτήσει της σταθεράς αλληλεπίδρασης. Η μεταβολή αυτή δίνεται στα διαγράμματα 3.4 και 3.5 αντίστοιχα.

Και στις δύο περιπτώσεις βλέπουμε ότι η ενέργεια προσεγγίζει εκθετικά



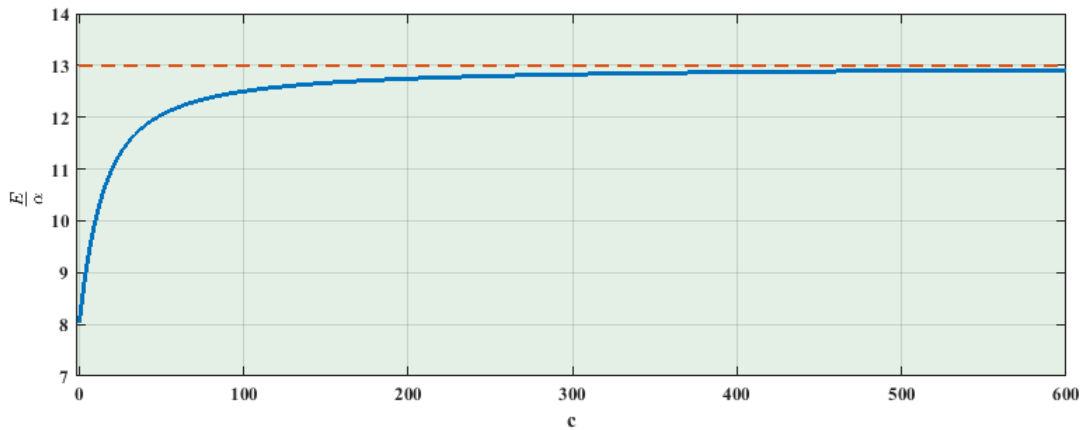
Σχήμα 3.3: Ενεργειακό φάσμα

για μια σταθερή τιμή, 5 για την θεμελιώδη και 13 για την πρώτη διεγερμένη κατάσταση, καθώς η σταθερά αλληλεπίδρασης τείνει στο όριο Tonks - Girardeau. Θα μπορούσαμε να προσθέσουμε επίσης ότι η θεμελιώδης κατάσταση προσεγγίζει γρηγορότερα (μικρότερο  $c$ ) την σταθερή τιμή της.



Σχήμα 3.4: Ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης



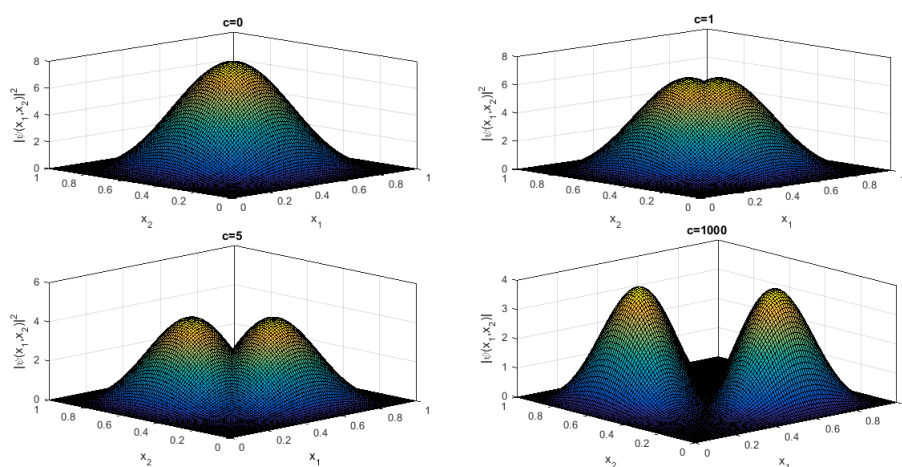


Σχήμα 3.5: Ενέργεια πρώτης διεγερμένης κατάστασης

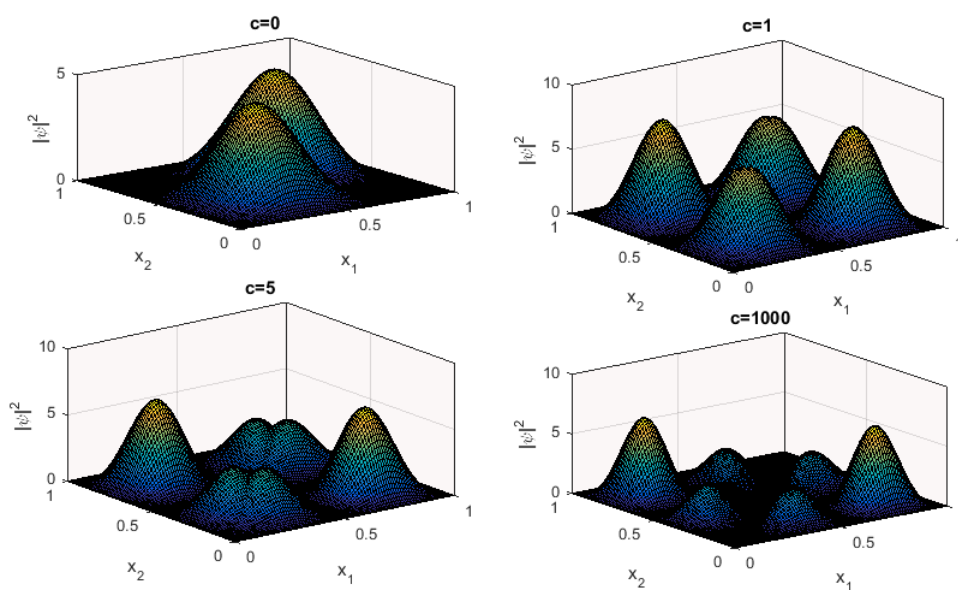
### 2.3 Εξέλιξη της κατάστασης του συστήματος

Έχοντας προσδιορίσει τόσο το ενεργειακό φάσμα όσο και την ενέργεια των δύο πρώτων καταστάσεων του συστήματος θα δούμε πώς μεταβάλλεται και η κατάσταση του συστήματος των δύο μποζονίων με την αύξηση της ισχύς της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης. Αυτό μπορεί να γίνει μέσω γραφικής απεικόνισης των αναλυτικών εκφράσεων (2.42) και (2.43) για την κυματοσυνάρτηση του συστήματος στις περιοχές I και II στις οποίες οι ορμές  $k_1, k_2$  προσδιορίζονται μέσω των  $K, k$ . Η μεταβολή αυτή δίνεται από τα σχήματα 3.6 και 3.7.

Στα δύο σχήματα φαίνεται ξεκάθαρα πως η κυματοσυνάρτηση του συστήματος των αλληλεπιδρώντων μποζονίων προσεγγίζει αυτή των ελεύθερων φερμιονίων καθώς η ισχύς της αλληλεπίδρασης τείνει στο όριο Tonks -Girardeau. Έτσι λοιπόν παρατηρούμε και εδώ το φαινόμενο της φερμιονοποίησης ενός γνήσια αλληλεπιδρώντως συστήματος πράγμα το οποίο επαληθεύει και το θεώρημα του Girardeau περί της απεικόνισης συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων μποζονίων σε συστήματα ελεύθερων φερμιονίων.



Σχήμα 3.6: Θεμελιώδης κατάσταση



Σχήμα 3.7: Πρώτη διεγερμένη κατάσταση

## 2.4 Πίνακας πυκνότητας

Ένα μέγεθος το οποίο χρησιμοποιείται πολύ συχνά στην περιγραφή συστημάτων πολλών σωματιδίων είναι ο πίνακας πυκνότητας του συστήματος (Density Matrix) ο οποίος είναι ένας τελεστής που περιέχει όλες τις πληροφορίες σχετικά με το σύστημα όπως και η κυματοσυνάρτηση. Το πλεονέκτημα του πίνακα πυκνότητας είναι ότι μπορεί να περιγράψει και μεικτές καταστάσεις δηλαδή καταστάσεις που περιγράφουν συλλογές από συστήματα κάτι που είναι πολύ σημαντικό στην περιγραφή συστημάτων πολλών σωμάτων. Έτσι λοιπόν ο πίνακας πυκνότητας μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό όλων των παρατηρήσιμων φυσικών μεγεθών ενός συστήματος.

Στην περίπτωση ενός συστήματος που αποτελείται από  $N$  σωματίδια σε μία διάσταση οι καθαρές καταστάσεις του  $|\psi\rangle$  (Pure States) περιγράφονται από τον εξής πίνακα πυκνότητας

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi| \quad (3.1)$$

Αυτός στην περίπτωση όπου έχουμε συνεχείς μεταβλητές παίρνει τη μορφή

$$\hat{\rho} = \int dx_{1\dots N} \int dx'_{1\dots N} \psi(x_1, \dots, x_N) \psi^*(x'_1, \dots, x'_N) |x_1, \dots, x_N\rangle \langle x'_1, \dots, x'_N| \quad (3.2)$$

Ο πίνακας πυκνότητας έχει τις ακόλουθες βασικές ιδιότητες

- ▶ είναι ερμιτιανός, δηλαδή  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$
- ▶ για καθαρές καταστάσεις ισχύει ότι  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$
- ▶ έχει ίχνος μονάδα,  $Tr(\hat{\rho}) = 1$ , οπότε για καθαρές καταστάσεις θα ισχύει

$$\text{επίσης } Tr(\hat{\rho}^2) = Tr(\hat{\rho}) = 1$$

- η αναμενόμενη τιμή για κάθε παρατηρήσιμο φυσικό μέγεθος δίνεται από τη σχέση  $\langle \hat{A} \rangle = Tr(\hat{A} \cdot \hat{\rho})$

Από τον πίνακα πυκνότητας μπορούμε να εξάγουμε μια άλλη ποσότητα η οποία έχει θεμελιώδη σημασία στη μέλετη των συστημάτων πολλών σωματιδίων και είναι ο ανηγμένος πίνακας πυκνότητας του ενός σωματιδίου (Reduced Single Particle Density Matrix) ο οποίος για ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων δίνεται από τη σχέση

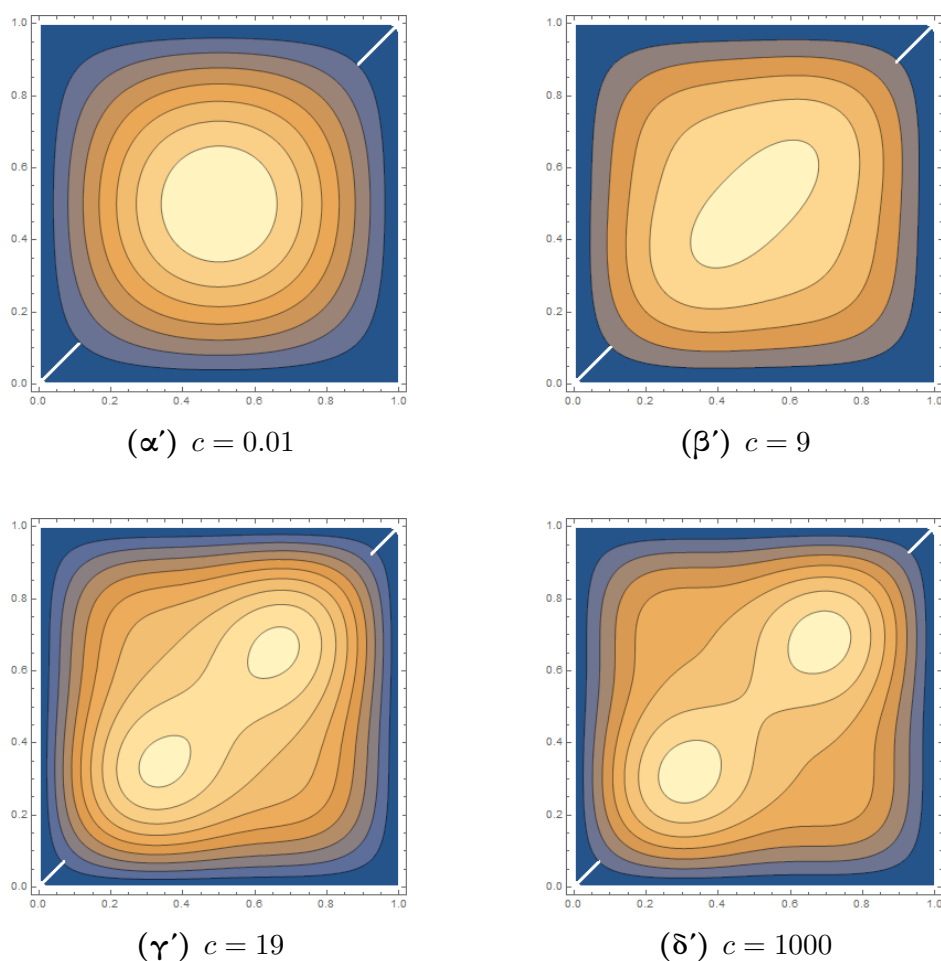
$$\rho(x, x') = \int dx_2 \cdots dx_N \psi(x, x_2, \cdots, x_N) \psi^*(x', x_2, \cdots, x_N) \quad (3.3)$$

που προκύπτει από την ολοκλήρωση ως προς τους βαθμούς ελευθερίας όλων των υπόλοιπων σωματιδίων.

Για το σύστημα μας, το οποίο αποτελείται από δύο σωματίδια (μποζόνια), ο αντίστοιχος ανηγμένος πίνακας πυκνότητας δίνεται από τη σχέση

$$\rho(x_1, x'_1) = \int_0^L dx_2 \psi(x_1, x_2) \psi^*(x'_1, x_2) \quad (3.4)$$

όπου  $\psi(x_1, x_2)$  είναι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος (σχέσεις 2.42 και 2.43). Το παραπάνω ολοκλήρωμα λύνεται αναλυτικά (εδώ υπολογίστηκε με χρήση Mathematica) και το αποτέλεσμα για τέσσερις τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης δίνεται στο διάγραμμα 3.8.



Σχήμα 3.8: Ανηγμένος πίνακας πυκνότητας

Μέσω του ανηγμένου πίνακα πυκνότητας βλέπουμε τη συμπεριφορά του ενός σωματιδίου υπό την παρουσία του δεύτερου το οποίο και αποτελεί το περιβάλλον για το πρώτο. Έτσι ενώ το συνολικό σύστημα είναι κλειστό μπορούμε να θεωρήσουμε ότι το καθένα από τα δύο εγκλωβισμένα σωματίδια συγκροτεί ένα ανοιχτό σύστημα υπο την έννοια ότι το άλλο σωματίδιο αποτελεί το περιβάλλον του.

Ο ανηγμένος πίνακας πυκνότητας εκφράζει την αυτοσυσχέτιση ενός σωματιδίου και μπορεί να ειδωθεί ως η πιθανότητα, έχοντας αρχικά ανιχνεύσει το σωματίδιο στη θέση  $x_1$ , να το ανιχνεύσουμε στη θέση  $x'_1$  με δεύτερη μέτρηση

(αμέσως μετά την πρώτη). Κλασικά ισχύει ότι  $\rho(x_1, x'_1) = \delta(x_1 - x'_1)$ , οπότε οι μη μηδενικές τιμές εκτός της διαγωνίου στο διάγραμμα του  $\rho(x_1, x'_1)$  πηγάζουν από καθαρά κβαντικές συσχετίσεις μεταξύ των σωματιδίων του συστήματος.

Στο διάγραμμα του ανηγμένου πίνακα πυκνότητας βλέπουμε επίσης ότι τα μη διαγώνια στοιχεία παίζουν όλο και μικρότερο ρόλο καθώς αυξάνεται η ισχύς της αλληλεπίδρασης ενώ επιπλέον παρατηρείται και ισχυρός χωρικός εντοπισμός στην διαγώνιο  $x_1 = x'_1$ . Στο όριο Tonks-Girardeau (3.8δ') δημιουργούνται δύο έντονες, συμμετρικές, ως προς την κύρια διαγώνιο, περιοχές εντοπισμού του σωματιδίου ενώ επίσης εξακολουθούν να υπάρχουν και μη διαγώνιες συνεισφορές.

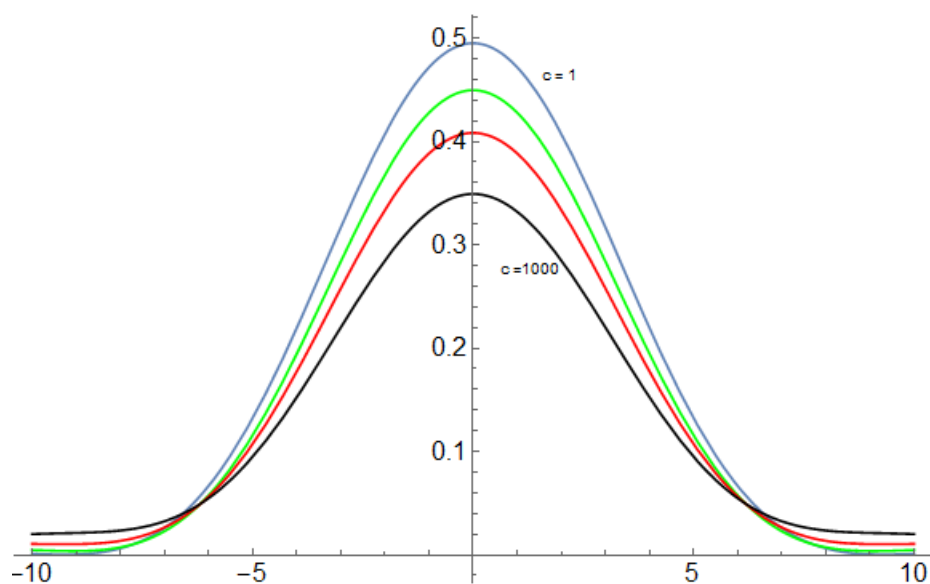
## 2.5 Κατανομή ορμής

Από το θεώρημα απεικόνισης αλληλεπιδρώντων μποζονίων σε ελεύθερα φερμιόνια, οι κατανομές πυκνοτήτων και το ενεργειακό φάσμα θα είναι το ίδιο στο όριο Tonks-Girardeau. Υπάρχει όμως μία ποσότητα η οποία διαφέρει αισθητά μεταξύ των δύο αυτών συστημάτων, μποζονικών και φερμιονικών, και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να μπορεί να γίνει διάκριση μεταξύ των συστημάτων [6], [8]. Η ποσότητα αυτή είναι η κατανομή των ορών των δύο σωματιδίων (Momentum distribution)

Έχοντας προσδιορίσει τον ανηγμένο πίνακα πυκνότητας του ενός σωματιδίου η μονοσωματιδιακή κατανομή ορμής δίνεται από τη σχέση

$$n(k) = \frac{1}{2\pi} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx'_1 \rho(x_1, x'_1) e^{-ik(x_1 - x'_1)} \quad (3.5)$$

Το διάγραμμά της κατανομής για τέσσερις τιμές της σταθεράς αλληλεπίδρασης  $c$  φαίνεται στο σχήμα 3.9.



Σχήμα 3.9: Κατανομή ορμής

Παρατηρούμε ότι η κατανομή της ορμής ανοίγει καθώς αυξάνεται η ι-σχύς της αλληλεπίδρασης μεταξύ των μποζονίων ( $c \rightarrow \infty$ ) γεγονός που δείχνει τον έντονο χωρικό εντοπισμό των σωματιδίων τα οποία τείνουν να καταλάβουν αντιδιαμετρικές θέσεις μέσα στο χώρο  $[0, L]$  οπότε και η χωρική ομοιομορφία που παρατηρείται στη περίπτωση της ασθενούς αλληλεπίδρασης τώρα αρχίζει να χάνεται .

## Κεφάλαιο 4

---

### Επίλογος

---

Στην παρούσα διπλωματική εγγρασία μελετήθηκε το σύστημα δύο αλληλεπιδρώντων μποζονίων τα οποία είναι εγκλωβισμένα σε χωρίο  $[0, L]$ , με αδιαπέραστα τοιχώματα και τα οποία αλληλεπιδρούν μεταξύ τους σημειακά με δυναμικό  $\delta$ -συνάρτησης. Ακολουθώντας την μεθοδολογία και τον μαθηματικό φορμαλισμό που αναπτύχθηκε για συστήματα πολλών σωματιδίων, με χαρακτηριστικό παράδειγμα το μοντέλο Lieb-Liniger, προσδιορίστηκαν οι αναλυτικές εκφράσεις για την κυματοσυνάρτηση και την ενέργεια του συστήματος. Έτσι λοιπόν έγινε εφικτός ο αναλυτικός υπολογισμός χβαντικών συσχετίσεων όπως είναι η κατανομή ορμής του και ο πίνακας πυκνότητας του συστήματος.

Εκτός από τις συγκεκριμένες συσχετίσεις μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει και η μελέτη μιας άλλης θεμελιώδους ποσότητας των σύνθετων χβαντικών συστημάτων, η εντροπία von Neumann ( $S_N$ ), η οποία αποτελεί ένα πολύ καλό εργαλείο μέτρησης της χβαντικής διεμπλοκής (Quantum Entanglement) ενός συστήματος δύο μποζονίων [10].



---

Η εντροπία von Neumann ορίζεται από την σχέση

$$S = - \sum_i \lambda_i \log_2(\lambda_i) \quad (4.1)$$

όπου για τα  $\lambda_i$  ισχύει ότι  $\sum_i \lambda_i = 1$  και τα οποία υπολογίζονται μέσω της εύρεσης των ‘φυσικών τροχιακών’ (Natural Orbitals).

Τα φυσικά τροχιακά είναι ιδιοκαταστάσεις του ανηγμένου μονοσωματιδιακού πίνακα πυκνότητας και αναπαριστούν **ενεργές** μονοσωματιδιακές καταστάσεις. Η εξίσωση ιδιοτιμών που πρέπει να ικανοποιούν είναι η ακόλουθη:

$$\int dx' \rho(x, x') \phi_i(x') = \lambda_i \phi_i(x') \quad (4.2)$$

για  $i = 0, 1, 2, \dots$ , όπου τα  $\phi_i(x)$  είναι τα φυσικά τροχιακά και  $\lambda_i$  οι αντίστοιχες ιδιοτιμές.

Γενικά, τα φυσικά τροχιακά είναι διαφορετικά από τις μονοσωματιδιακές ιδιοκαταστάσεις και για δέσμια συστήματα δεν υπάρχει μια ξεκάθαρη συσχέτιση μεταξύ τους. Η ιδιοτιμή  $\lambda_i$  εκφράζει τον αριθμό κατάληψης του  $i$ -οστού φυσικού τροχιακού και ουσιαστικά είναι η πιθανότητα κατάληψης του. Για το λόγο αυτό πρέπει να ισχύει ότι  $\sum_i \lambda_i = 1$ .

Ενδιαφέρον παρουσιάζει επίσης και η μελέτη της γενικής περίπτωσης ενός συστήματος  $N$ -σωματιδίων [4], όπου έχουμε προσέγγιση ενός ρεαλιστικού χβαντικού αερίου και μπορούν να υπολογιστούν αντίστοιχες φυσικές ποσότητες ή συσχετίσεις στο θερμοδυναμικό όριο.

Τέλος, μπορεί να εξεταστεί η περίπτωση ενός συστήματος δύο αλληλεπιδρώντων μποζονίων, του οποίου όμως τα τοιχώματα μεταβάλλονται με το χρόνο με τρόπο στοχαστικό και να μελετηθεί έτσι η διαδικασία της Decoherence. Με

---

αυτό τον τρόπο μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση του χρόνου decoherence και για την ακρίβεια ένα ανώτερο φράγμα του, σε ένα ρεαλιστικό μακροσκοπικό σύστημα.

---

## Βιβλιογραφία

---

- [1] BATCHELOR, MT AND GUAN, XI-WEN AND OELKERS, NORMAN AND LEE, C. The 1D interacting Bose gas in a hard wall box. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 38, 36 (2005), 7787.
- [2] BETHE, HANS. Zur theorie der metalle. *Zeitschrift für Physik* 71, 3-4 (1931), 205–226.
- [3] GARCÍA-MARCH, MA AND YUSTE, A AND JULIÁ-DÍAZ, B AND POLLS, A. Mesoscopic superpositions of Tonks-Girardeau states and the Bose-Fermi mapping. *Physical Review A* 92, 3 (2015), 033621.
- [4] GAUDIN, M. Boundary energy of a Bose gas in one dimension. *Physical Review A* 4, 1 (1971), 386.
- [5] GIRARDEAU, MARVIN. Relationship between systems of impenetrable bosons and fermions in one dimension. *Journal of Mathematical Physics* 1, 6 (1960), 516–523.
- [6] GIRARDEAU, MD AND WRIGHT, EM AND TRISCARI, JM. Ground-state properties of a one-dimensional system of hard-core bosons in a harmonic trap. *Physical Review A* 63, 3 (2001), 033601.

- 
- [7] LIEB, ELLIOTT H AND LINIGER, WERNER. Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state. *Physical Review* 130, 4 (1963), 1605.
- [8] LIN, YUAN AND WU, BIAO. Ground state of hard-core bosons in one-dimensional periodic potentials. *Physical Review A* 75, 2 (2007), 023613.
- [9] MURPHY, DS AND McCANN, JF AND GOOLD, JOHN AND BUSCH, TH. Boson pairs in a one-dimensional split trap. *Physical Review A* 76, 5 (2007), 053616.
- [10] SUN, BO AND ZHOU, DUAN LU AND YOU, LI. Entanglement between two interacting atoms in a one-dimensional harmonic trap. *Physical Review A* 73, 1 (2006), 012336.
- [11] TONKS, LEWI. The complete equation of state of one, two and three-dimensional gases of hard elastic spheres. *Physical Review* 50, 10 (1936), 955.
- [12] WEI, BO-BO AND GU, SHI-JIAN AND LIN, HAI-QING. Ground-state properties of a Tonks-Girardeau gas in a periodic potential. *Physical Review A* 79, 6 (2009), 063627.
- [13] YIN, XIANGGUO AND HAO, YAJIANG AND CHEN, SHU AND ZHANG, YUNBO. Ground-state properties of a few-boson system in a one-dimensional hard-wall split potential. *Physical Review A* 78, 1 (2008), 013604.
- [14] YU-ZHU, JIANG AND YANG-YANG, CHEN AND XI-WEN, GUAN. Understanding many-body physics in one dimension from the Lieb-Liniger model. *Chinese Physics B* 24, 5 (2015), 050311.