

Entrega: Weakly interacting and confined bosons at low density

Iris Ortega i Ferran Rodríguez

16 de juny de 2023

1 Introducció

Per fer l'exercici s'ha escrit un nou programa amb *Python* i les llibreries *math*, *argparse*, *numpy* i *pandas*. L'hem anomenat *Iris_Ortega-Ferran_Rodriguez.py*¹. Tots els resultats exposats en aquest treball obtinguts amb aquest programa, han estat comprovats amb els obtinguts amb el programa de *Fortran* proporcionat. Per saber com funciona el nou programa es pot introduir al terminal:

```
python3 Iris_Ortega-Ferran_Rodriguez.py -h.
```

Per usar-lo només requereix un argument, el *path* on es troba el fitxer *input*, un fitxer *.txt* amb tantes files com diferents valors de les variables es vulguin introduir i amb columnes corresponents a: la longitud de *scattering* en unitats d'oscil·lador (**a0**), el nombre de passes (**N_steps**), la mida del pas (**step**), el nombre de partícules (**N**), el pas en el 'temps' (**time**), el valor d'alfa (paràmetre d'inici per la funció de l'oscil·lador harmònic, **alpha**) i el nombre d'iteracions (**iter**). Afegint **-ao** obtenim el cas de l'oscil·lador harmònic, mentre que afegint **-tf**, obtenim els resultats per l'aproximació de Thomas-Fermi.

2 Interacció nul·la: solució per l'oscil·lador harmònic

En el nostre programa, per tenir la solució per l'oscil·lador harmònic només cal afegir un darrer argument en la terminal: **-ao**. Això fa que la variable *cequ* del programa passi a valer 0.

En córrer el programa per un *input* tal com el de la Taula 1, obtenim $E = 1.4999665803921967$ per l'energia i $\mu = 1.4999665800446846$ pel potencial químic, ambdós en unitats de l'oscil·lador harmònic. La diferència entre ambdós valors és de 10 ordres de magnitud inferior a aquests: $E - \mu = 3 \cdot 10^{-10}$. Per tant, tenim $E \approx \mu \approx 1.5$.

a0	N_steps	step	N	time	alpha	iter
0.00433	700	0.015	1000000	0.00005	0.3	70000

Taula 1: *Input* del programa per l'apartat a0).

Les dues magnituds valen aproximadament el mateix, ja que en treure el terme corresponent a la interacció, l'equació de Gross-Pitaevski adimensional es redueix a una equació de Schrödinger adimensional per un potencial donat. Els autovalors resultats de l'equació de Schrödinger són les possibles energies del sistema, mentre que els de l'equació de Gross-Pitaevskii són els del potencial químic. Com que la part de l'esquerra d'ambdues equacions s'igualen, el resultat que obtenim per la dreta, els autovalors, és aproximadament el mateix.

3 Solució de l'equació de Gross-Pitaevskii: dependència en N

Per trobar les solucions a l'equació de Gross-Pitaevskii hem usat com a *input* el proporcionat en el fitxer *grosspita.grau.input.txt*, que es troba recollit en la Taula 2. Els resultats es troben a la Taula 3.

¹El programa ha estat escrit per l'Iris, les dades han sigut representades pel Ferran. La redacció s'ha fet entre els dos.

N	μ	μ_T	E_T	$E_{cin.}$	$E_{osc.}$	$\mu_{inter.}$
1000000	42.119	30.059	30.120	0.061	18.060	11.999
100000	16.847	11.980	12.104	0.124	7.238	4.743
10000	6.866	4.801	5.042	0.240	2.977	1.824
1000	3.045	1.987	2.425	0.438	1.367	0.620
100	1.788	0.995	1.652	0.656	0.860	0.136

Taula 3: Resultats d'introduir al programa l'*input* de la Taula 2. Per cada nombre de partícules al sistema tenim el potencial químic mitjà corresponent, el total, l'energia total, la cinètica, la corresponent a l'oscil·lador harmònic i la corresponent al terme d'interacció. S'observa que el potencial total equival a la suma del corresponent a l'oscil·lador harmònic més el del terme d'interacció mentre que l'energia total és el potencial total més l'energia corresponent al terme cinètic.

$a0$	N_steps	$step$	N	$time$	$alpha$	$iter$
0.00433	700	0.015	1000000	0.00005	0.3	70000
0.00433	600	0.015	100000	0.0001	0.4	50000
0.00433	400	0.015	10000	0.0001	0.8	40000
0.00433	400	0.020	1000	0.0001	0.5	50000
0.00433	300	0.020	100	0.0001	0.5	50000

Taula 2: *Input* del programa per l'apartat a), corresponent al fitxer *grosspita.grau.input.txt*.

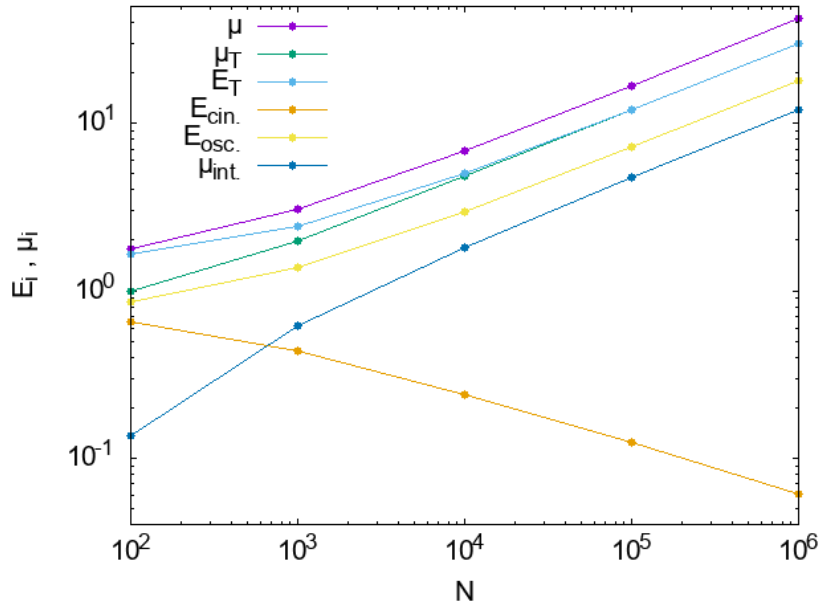


Figura 1: Representació doble logarítmica de les dades recollides a la Taula 3.

Observem com a la Fig. 1 l'energia i el moment totals augmenten segons N , amb la mateixa força amb què ho fan les diferents components d'aquestes, exceptuant l'energia cinètica, que sembla que disminueixi amb el comportament oposat a les altres components.

Com més partícules hi hagi, més difícil en serà extreure'n una del sistema. Per això el potencial químic i les diferents energies (menys la cinètica) augmenten. L'energia cinètica disminueix amb el nombre de partícules perquè aquestes xocaran més i perdran més energia.

Veiem com, en la representació doble logarítmica, es tendeix a un comportament lineal per N grans, presentant desviacions significatives per $N < 10^3 - 10^4$.

El potencial i l'energia totals tendeixen a igualar-se per N grans.

4 Aproximació de Thomas-Fermi

N	μ	μ_T	E_T	$E_{osc.}$	$\mu_{inter.}$
1000000	42.071	30.052	30.052	18.033	12.019
100000	16.748	11.964	11.964	7.180	4.784
10000	6.670	4.763	4.763	2.856	1.907
1000	2.647	1.897	1.897	1.147	0.750
100	1.045	0.759	0.759	0.472	0.286

Taula 4: Resultats d'introduir al programa l'*input* de la Taula 2 i córrer el programa usant l'aproximació de Thomas-Fermi (afegint `-tf` a la línia de comandes). Per cada nombre de partícules al sistema tenim el potencial químic mitjà corresponent, l'energia total, la corresponent a l'oscil·lador harmònic i la corresponent al terme d'interacció. Observem que en aquest cas, el potencial total i l'energia total són equivalents.

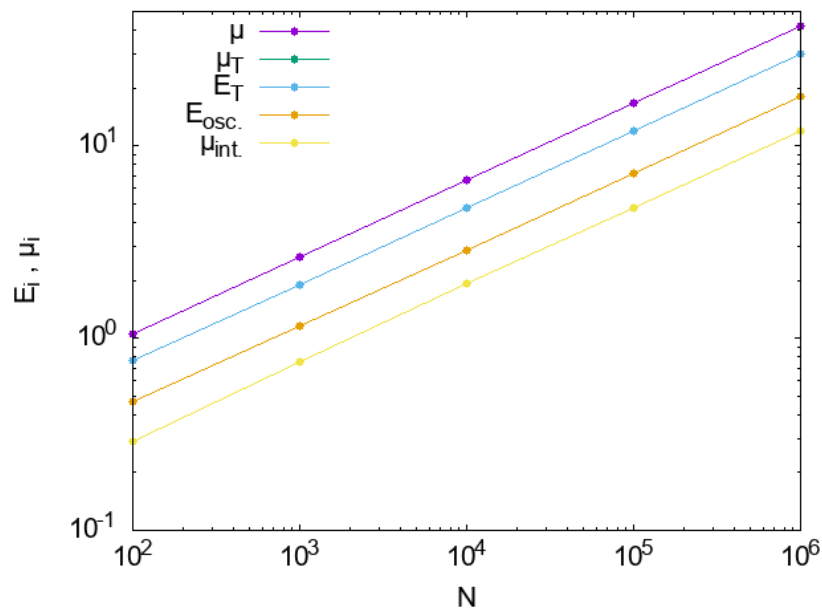


Figura 2: Representació doble logarítmica de les dades recollides a la Taula 4. Els valors per a μ_T i E_T són iguals.

Els resultats per a l'aproximació de Thomas-Fermi s'assemblen més als de l'apartat anterior com més gran és N , ja que l'energia cinètica disminueix quan s'augmenta N .

Si fem la regressió lineal de les dades de l'energia total de la Fig. 2, obtenim que $E_T = 0.12N^{0.40}$, amb un error dels coeficients molts ordres de magnitud inferior. Per tant, veiem que les diferents energies i potencials tenen una dependència amb el nombre de partícules de $\sim N^{2/5}$, que en l'aproximació de Thomas-Fermi es compleix per tot el rang de N mentre que quan tenim energia cinètica veiem desviació a N baixes, com és d'esperar.

5 Perfil de la densitat

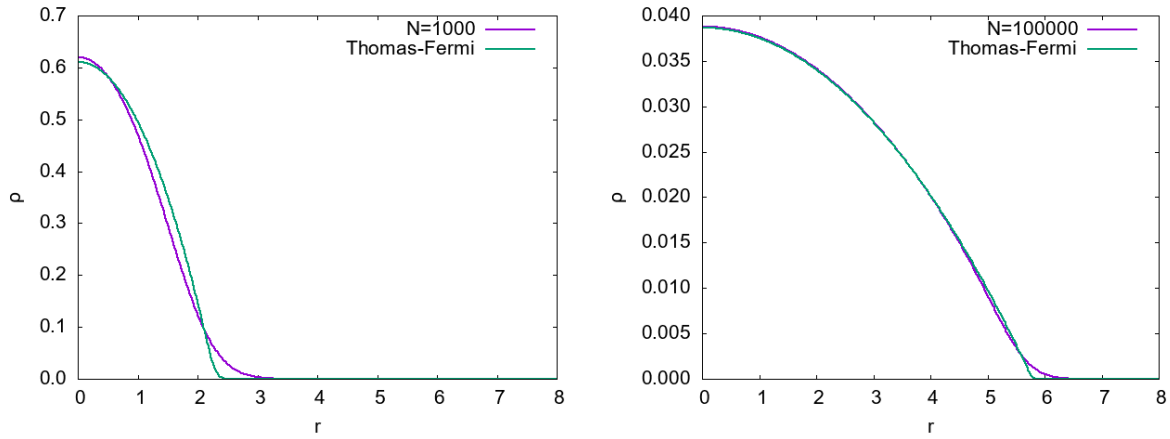


Figura 3: Representació del perfil de densitat normalitzat amb $N = 1000$ (esquerra) i $N = 100000$ (dreta), comparant el cas sense aplicar amb el cas en què s'aplica l'aproximació de Thomas-Fermi.

Com ja comentàvem en la secció anterior, l'aproximació de Thomas-Fermi s'ajusta millor per N grans, tal i com es pot veure altre cop en la Fig. 3.

6 Comprovació numèrica del teorema del virial

Per trobar l'equació corresponent al teorema del Virial ens construïm la funció $\Psi_\lambda(\{\vec{r}'\}) = \lambda^{3N/2} \Psi_{G.S.}(\{\lambda\vec{r}\})$, on G.S. vol dir *ground state*. Aleshores, calculem l'autovalor de l'equació de GP:

$$\langle E(\lambda) \rangle = \int d^{3N} \vec{r}' \Psi_\lambda^*(\{\vec{r}'\}) \mathcal{H} \Psi_\lambda(\{\vec{r}'\}) . \quad (1)$$

Fent el canvi de variable $\vec{r}' = \lambda \vec{r}$, obtenim per partícula:

$$\nabla_{\vec{r}'}^2 = \lambda^2 \nabla_{\vec{r}}^2, \quad \vec{r}'^2 = \frac{\vec{r}^2}{\lambda^2}, \quad |\Psi_\lambda(\{\vec{r}'\})|^2 = \lambda^3 \Psi_{G.S.}(|\{\vec{r}\}'|)^2 . \quad (2)$$

Substituint aquests valors obtenim:

$$e = \lambda^2 e_{\text{cin.}} + \frac{1}{\lambda^2} e_{\text{osc.}} + \lambda^3 e_{\text{int.}} . \quad (3)$$

I imposant condició d'extrem obtenim l'equació del Virial:

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=1} = 2e_{\text{cin.}} - 2e_{\text{osc.}} + 3e_{\text{int.}} = 0 . \quad (4)$$

Aleshores, aplicant l'Eq. 4 pels resultats de la Taula 3, obtenim els valors de la Taula 5.

N	$2e_{\text{cin.}} - 2e_{\text{osc.}} + 3e_{\text{int.}}$
1000000	$4 \cdot 10^{-4}$
100000	$5 \cdot 10^{-6}$
10000	$2 \cdot 10^{-5}$
1000	$4 \cdot 10^{-5}$
100	$4 \cdot 10^{-5}$

Taula 5: Resultats de fer la suma del teorema del Virial corresponent a la nostra equació de GP per diferents valors de N amb les dades recollides en la Taula 3. S'han aproximat al primer valor diferent de 0 per saber els ordres de magnitud de diferència respecte al resultat del teorema del Virial.

Observem que els resultats difereixen del 0 del teorema del Virial en 4 fins a 6 ordres de magnitud. Per tant, considerem que el teorema es compleix.