

BEC simulazioa

Hugo González González

2026-02-18

This analysis provides ... |

1 Oinarrizko teoria

Atal hau (Pitaevskii eta Stringari 2016) liburuan oinarrituta dago. Aztertuko ditugu oinarrizko gauzak GPE ekuazioa ulertu ahal izateko.

1.1 Ez-uniforme Bose gasak T=0K

Ikertuko ditugu Bose gas diluituen dinamika.

1.1.1 Gross-Pitaevskii ekuazioa (GPE)

Elektromagnetismoan egiten dugun bezala, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ eremu eragilea eremu klasiko batekin, $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$, ordezkatuko dugu. Azken honi kondentsatuaren uhin-funtzioa edo ordena-parametroa deitzen zaio. Orain behar dugu ekuazio bat duena funtzio klasikoaren dinamika. Hau lortzeko gogoratu Heisemberg-en irudian hurrengo erlaziona bete behar duela $\hat{\Psi}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}, t) + \int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

non $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ kanpo-potentziala den eta $V(\mathbf{r}' - \mathbf{r})$

Aldaketa egin ahal izateko, Bornen hurbilketa bete beharko da. Honetarako V_{eff} bete beharko ditu energia txikiko sakabanaketaren baldintzak eta Ψ_0 era motelean aldatuko da elkarrekintza-potentzialaren barrutian. Hau betetzen bada \mathbf{r}' \mathbf{r} -rekin aldatu dezakegu.

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

non ordena-parametroa $g = \int V_{eff} d\mathbf{r}$ den. Hau s-wave sakabanaketaren a parametroaren funtzioan jar dezakegu:

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (3)$$

non a s-uhinen sakabanatze-luzera den eta m atomo baten masa.

Hau izango da Maxwell ekuazioen analogoa baina energia eta momentuaren erlaziona fotoienan izan beharrean De Brogliren erlaziona beteko dute.

Zenbait baldintza bete beharko dira Ekuazioa 2 erabili ahal izateko.

- BEC-a sortzeko partikula kopuru handia behar ditugu.
- Temperatura txikia izatea behar dugu partikulen artean sortzen diren elkarrekintzak txikiak izateko.
- Gure uhin funtzioa dago normalizatuta hurrengo moduan: $\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = N$
- Ekuazioa bete egingo da $\mathbf{r} \gg a$ denean.

Hau guztia betetzen bada, gasaren dentsitatea kondentzatuarenarekin bat etorriko da:

$$n(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|^2 \quad (4)$$

Beste era bat izango da egoera estazionario bat inposatzen

$$\delta \left[-i\hbar \int \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi d\mathbf{r} dt + \int E dt \right] = 0 \quad (5)$$

akzioari. Honekin izango dugun ekuazioa

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\delta E}{\delta \Psi^*(\mathbf{r}, t)} \quad (6)$$

izango da, non energia funtzionalaren ordena-parametroa

$$E = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Psi|^2 + \frac{g}{2} |\Psi|^4 \right) d\mathbf{r} \quad (7)$$

Orain ikusiko ditugu Ekuazioa 2-ren kontserbazio legeak. Lehenengo, kontuan izanda $\int |\Psi|^2 d\mathbf{r} = N$ dela, hau da, partikula kopurua konstante mantentzen dela. Beraz, Ekuazioa 2 Ψ^* -rekin biderkatuz probabilitatearen kontserbazio legea lortzen da:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0 \quad (8)$$

non erabili dugun Ekuazioa 4 eta sartu dugun korronte dentsitatea:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = n \frac{\hbar}{m} \nabla S \quad (9)$$

non S ordena-parametroaren fsea den. Gogoratu, ordena-parametroa funtziokonplexua izanda honela idatzi dezakegula:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{n(\mathbf{r}, t)} e^{iS(\mathbf{r}, t)}. \quad (10)$$

Ekuazio honetatik lortu ahal dugu zein den kondentsatuaren abiadura fasearen bitartez:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S. \quad (11)$$

Gainera, ikusi dezakegunez hau irrotacionala izango da, zentsua daukana, azkenean superfluido guztiek propietate hau erakusten baitute.

Jakinda energia ere kontserbatu egingo dela lortu ahal izango dugu momentu dentsitatearen ekuazioa.

$$m \frac{\partial j_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = -n \frac{\partial V_{ext}}{\partial x_i}, \quad (12)$$

non

$$\Pi_{ik} = \frac{\hbar^2}{4m^2} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x_k} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x_i \partial x_k} + \text{c.c.} \right] + \frac{gn^2}{2} \delta_{ik}, \quad (13)$$

momentuaren fluxu tentsorea da. Ohartu, kanpo indar barik momentua kontserbatu egingo dela.

Erabilgarria da fasearentzako ekuazio bat lortzea. Hau lortzen da Ekuazioa 10 Ekuazioa 2 sartuz:

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} S + \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}_s^2 + V_{ext} + gn - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \nabla^2 \sqrt{n} \right) = 0. \quad (14)$$

Konturatu Ekuazioa 4 eta Ekuazioa 14 osatzen dutela ekuazio multzo bat analogoa dena GPE ekuazioarekin. \hbar ekuazioan sartzen da dentsitatearen gradientearren bitartez, honi deitzen zaio “presio kuantikoa”.

Ekuazioa 2-ren soluzio geldikorra forma simple bat du

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-\frac{i\mu t}{\hbar}}. \quad (15)$$

Denboraren menpekotasuna potentzial kimikoa zehazten du

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}, \quad (16)$$

guzti honekin Gross-Pitaevskii ekuazioa honela idatzi dezakegu

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2 - \mu \right) \Psi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad (17)$$

non suposatu egin dugu gure potentziala ez dela denboraren menpekoia. μ -ren balioa normalizazio baldintzak ezarriko digu.

1.1.2 Bortex interakzio txikiko Bose gasan

Esan dugunez, GPE deskribatuta dago Ekuazioa 15-ren bitartez, hau da, magnitude orden bat denborarekiko menpekotasuna duena, non menpekotasuna fase global bat deskribatzen duen potentziak kimikoaren funtzioa dena.

Orain aztertuko ditugu bortez soluzioak. Hauek ematen dira gure kondentsatuaren dentsitatea zerorantz doanean. Hauek ematen diren eremuak, berreskuratze luzera baino txikiagoko eskualdetan gertatzen dira eta kontuan izan behar dugu presio kuantikoaren terminoa GPE-n. Normalean, azkar biratzen duen erreferentzia sisteman izango dira egonkorak, sistema horretan energiaren funtzionala zero baita.

Superfluidoetan dauden biraketak ez dira solido zurrunean dauden bezalakoak $\mathbf{v} = \times \mathbf{r}$, baizik eta deskribatuta egongo da bortitzitatea difusioarekin: $\text{curl } \mathbf{v} = 2$. Hau konturatzen bagara, kontraesan bat izango da superfluidoak irrotazionalak direla esan genuelako, hau da, espero dugu hauek ez biratzea solido zurruna bezala.

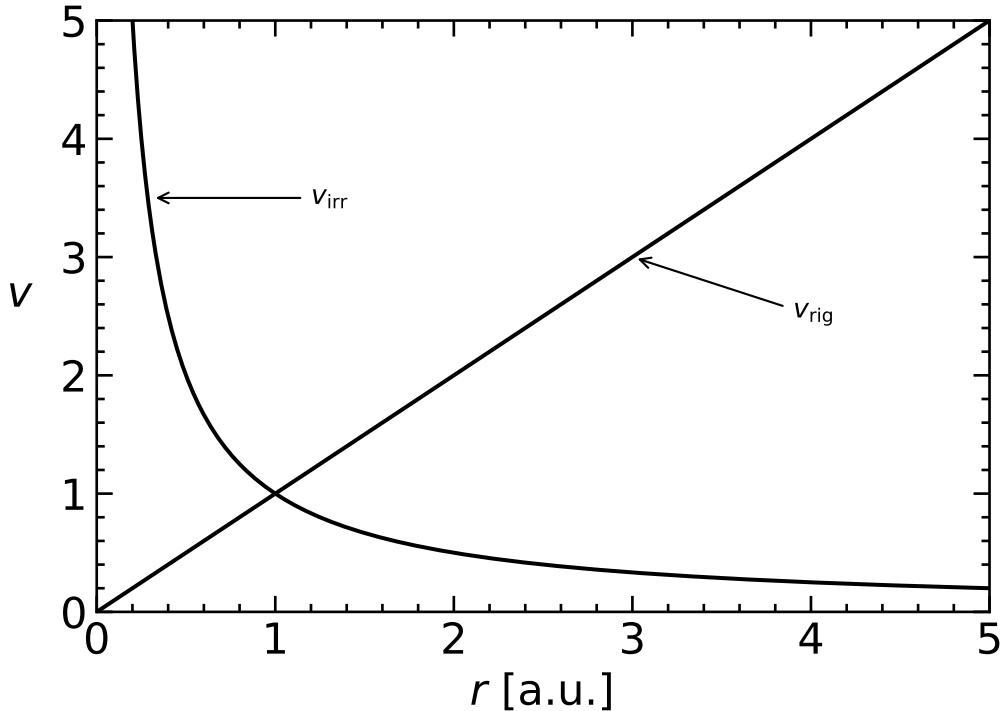
Demagun dugula R erradioko eta L luzerako zilindro batean gasa konfinatuta. Izango dugun soluzioa hurrengo formakoa izango da:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = e^{is\varphi} |\Psi_0(r)|, \quad (18)$$

non sartu ditugun koordenatu zilindrikoak z , r eta φ . s zenbaki osoa da, gure uhin-funtzioa balio bakarra izan dezan. Konturatzen bagara Ekuazioa 18 l_z -ren autobalioa izango da $l_z = s\hbar$ izaten. Beraz, bortex osoaren momentu angeluarra $L_z = Ns\hbar$ izango da. Ekuazioa 18 adierazten du gas bat biratzen hurrengo abiadura tangentzialarekin

$$v_s = \frac{\hbar}{m} \frac{s}{r}. \quad (19)$$

Konturatzen bagara hau guztiz desberdina da solido zurrunean geneukanarekin, hau $1/r$ -ren proportzionala baita (Irudia 1).



Irudia 1: Abiadura-eremu tangentziala fluxu irrotacionalerako (v_{irr}) eta errotazio rigidoko (v_{rig}) fluxurako. Abiadura-eremu irrotacionala $1/r$ bezala diberitzten da $r \rightarrow 0$ denean. Hemen r eta v unitate arbitrarioetan (a.u.) neurten dira.

Ordezkatzuz Ekuazioa 18 Ekuazioa 17, lortuko dugun adierazpena $|\Psi_0|$ -rentzat:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d|\Psi_0|}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 s^2}{2mr^2} |\Psi_0| + g|\Psi_0|^3 - \mu|\Psi_0| = 0. \quad (20)$$

Bortexaren distantzia handietara dakigu izan behar dugun dentsitatea kondentsatuarena izango dela $|\Psi_0| \rightarrow \sqrt{n}$. Hau dela eta, sartuko dugu hurrengo funtzio adimensionalala $f(\eta)$ eta gure

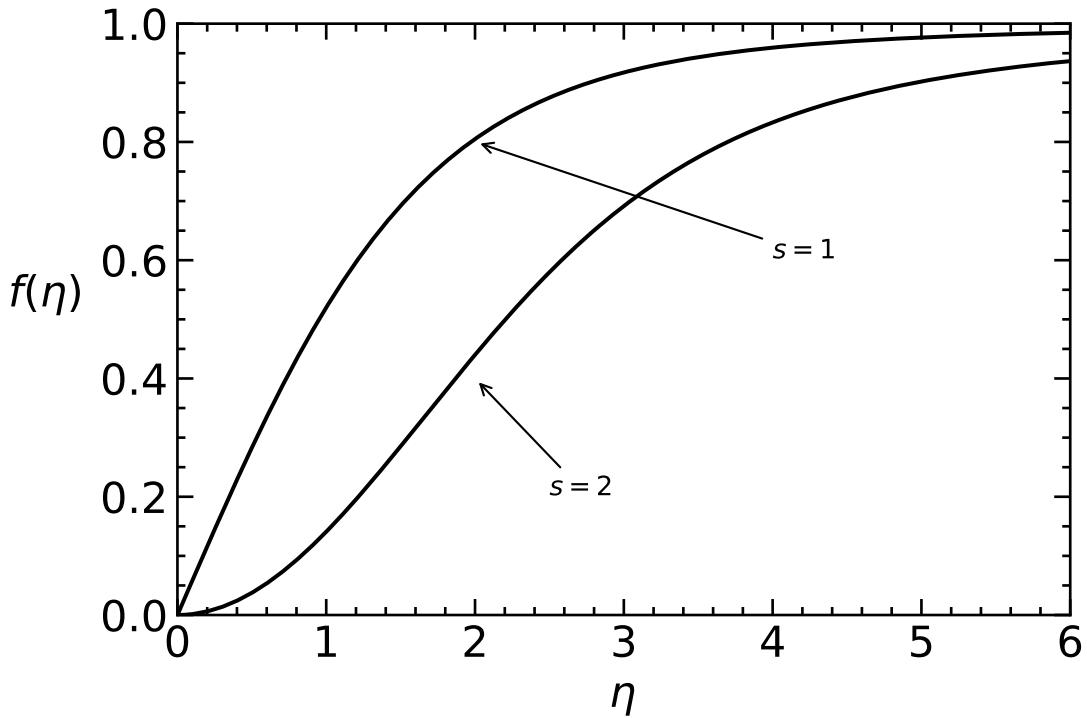
dentsitatea:

$$|\Psi_0| = \sqrt{n}f(\eta), \quad (21)$$

non $\eta = r/\xi$ eta $\xi = \hbar/\sqrt{2mgn}$ berreskuratze luzera den. Funtzio honek betetzen duen ekuazioa

$$\frac{1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df}{d\eta} \right) + \left(1 - \frac{s^2}{\eta^2} \right) f - f^3 = 0, \quad (22)$$

non muga baldintzak $f(\eta \rightarrow \infty) = 1$ eta $f(0) = 0$ izan behar diren. Hau numerikoki ebasten badugu ikusten da (Irudia 2) nola r ξ -ren ordenakoa denenean dentsitate aldaketa bortitz zaizango den.



Irudia 2: Ekuazioa 22-ren soluzio numerikoak $s = 1$ eta $s = 2$ kasuetarako. Ikusten da nola kondentsatuaren dentsitatea aldatzen den η -ren funtzioan.

1.2 Superfluidotasuna

Aipatu dugunez, BEC-a superfluido baten moduan jokatzen du tenperatura kritiko bat baino hotsago dagoenean. Parte honetan eztabaidatuko ditugu Landaren superfluidoen hidrodinamika.

mika, eta nola teoria honek ahalbidetzen dituen aurkitutako ordena-parametroaren fasearen fluktuazioak BEC-aren teorian.

1.2.1 Landauren irizpidea superfluidotasunarentzako

Landauren superfluidoen teoria garatzeko, energiaren eta momentuaren transformazio Galilearrak erabiliko erabiliko ditugu. E eta \mathbf{P} izango dira energia eta momentua fluidoaren pausaguneko sisteman K . Orduan K' sisteman, \mathbf{v} abiaduraz mugitzen dena K sistemarekiko, energia eta momentuaren adierazpenak:

$$E' = E - \mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \frac{1}{2} M V^2, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{P} - M \mathbf{v} \quad (23)$$

non M fluidoaren masa den.

Kontsidera dezagun fluido bat, kapilar baten zehar higitzen dena \mathbf{v} abiadurarekin. Fluidoa biskositatea badu, galdutako energia modelizatu ahal dugu higitzen den perturbazio baten moduan. Perturbazio honen energia eta momentua fluidoaren pausaguneko sisteman \mathbf{p} eta $E_0 + \epsilon(\mathbf{p})$ izango dira, non E_0 perturbazioaren oinarritzko energia den eta $\epsilon(\mathbf{p})$ kitzikapenak sortutako energia. Kapilarraren pausaguneko sisteman ikusiko dugu:

$$E' = E_0 + \epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} M v^2, \quad \mathbf{P}' = \mathbf{p} + M \mathbf{v} \quad (24)$$

Ekuazioa 24 ikusi ahal dugu nola energia eta momentu aldaketak, kapilarraren pausaguneko sisteman, $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ eta \mathbf{p} diren. Orduan, $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}$ negatiboa izan behar da berezko kitzikapena izateko. Hau posiblea izateko, $v > \epsilon(\mathbf{p})/p$ izan behar da. Suposatzen badugu \mathbf{p} momentua kapilarrari transferitzen diola, hau bero moduan disipatu egingo da eta fluidoa ez da egonkorra izango. Bainan abiadura,

$$v_c = \min_p \frac{\epsilon(\mathbf{p})}{p} \quad (25)$$

baino txikiago bada, kitzikapenak ezin dira agertu. Hau da Landauren superfluidotasunaren baldintza.

$$v < v_c \quad (26)$$

Fluidoaren eta kapilarraren abiadura erlatiboak, Ekuazioa 25 balio kritikoa baino txikiagoa bada. Orduna marruskadura gabeko fluxua izango dugu. Egoera honi, metaegonkorra deritzogu. Egonkorra da bat-bateko kitzikapenekiko.

Interakzio ahuleko Bose gasa Landauren irispidea betetzen du, non abiadura kritikoa soinuaren abiadura izango den. 4He -ren kasuan ere beteko egingo du Landauren irispidea, baina kasu honetan abiadura kritikoa soinuaren abiadura baino txikiagoa izango da, 4He partikulen elkarrekintza handiagoa baita.

Demagun temperatura txikia dela. Gure fluidoaren propietateak izango dira interakzio gabeko gas baten kitzikapenak (kuasipartikulak) oreka termikoan bezalakoak. Kuasipartikulak dira sistemaren masaren parte bat garraiatzen dituztenak. Gainera, hauek talka egitean kapilarren hormekin energia disipatu egingo dute, fluido normal baten moduan. Beraz, izango ditugu bi fase, bat normala \mathbf{v}_n -rekin eta beste bat superfluidoa dena \mathbf{v}_s , non abiadura hauek izango dira kapilarren pausaguneko sistemarekiko. Orduan kitzikapenen energia $\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n)$. Orekan dauden kitzikapenen, \mathbf{p} banaketa funtzioa:

$$N_{\mathbf{p}} = \left[\exp \left(\frac{\epsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{p} \cdot (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n)}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (27)$$

Ekuazio hau betetzeko \mathbf{p} -ren balio guztielarako (hau da, kitzikapenen energia positiboa izateko) $|\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n|$ abiadura kritikoa baino txikiagoa izan beharko da. Orduan, $N_{\mathbf{p}}$ beti izango da positiboa. Oreka termodinamikoan gaudenean, superfluido fasearen eta fase normalaren arteko marruskadurak ez dago. Hau gertatzekotan, gero eta kitzikapen gehiago sortuko lirateke eta, ondorioz, superfluido fasea apurtuko zen.

Kontuan izanda bi faseak batera daudela, fluidoaren masa dentsitatea idatz dezakegu hurrengo moduan: $\rho = \rho_n + \rho_s$ ((Pitaevskii eta Stringari 2016) erabiltzen du $\rho = nm$ dentsitatea hemendik aurrera literatura orokorrean hau egiten baitenez, n erabili beharrean). Likidoaren masa korrontea definitu dezakegu:

$$m\mathbf{j} = \rho_s \mathbf{v}_s + \rho_n \mathbf{v}_n \quad (28)$$

Hau erabili ahal dugu definitzeko fluido normalaren dentsitatea. Jar gaitezen superfluidoaren pausaguneko sisteman, orduan $m\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n$ izango dugu. Beraz, likidoak dakarren momentu osoa $\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{p}} N_{\mathbf{p}} \mathbf{p}$ izango da. Onekin, Ekuazioa 28 berridatzi dezakegu:

$$m\mathbf{j} = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} N_{\mathbf{p}} \quad (29)$$

eta esan dugunez, superfluidoaren pausaguneko sisteman gaudenez

$$\rho_n \mathbf{v}_n = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} N_{\mathbf{p}} \quad (30)$$

izango dugu. \mathbf{v}_n txikia izango denez (oreka termikoan egoteko) $N_{\mathbf{p}}$ seriean garatu dezakegu termino linealerarte. Hau eginez, lortuko dugu fase normalaren masa dentsitatea

$$\rho_n = -\frac{1}{3} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dN_{\mathbf{p}}(\epsilon)}{d\epsilon} p^2, \quad (31)$$

isotropikoa izango dena \mathbf{p} -rekiko. Oso erabilgarria da, kalkulatu ahal dugulako fase normalaren banaketa kitzikapenen funtzioen bitartez. Baino zenbait limite dauzkagu, $N_{\mathbf{p}}$ ez badago ondo definitua, desorden handia dogoenean, beste era bat bilatu beharko dugu kalkulatu ahal izateko fase normalaren dentsitatea.

1.3 Bose-Einstein kondentsatua eta superfluidotasuna

Orain nahi dugu BEC-aren eta superfluidoasunaren arteko erlazioa aztertu. Lehen egin dugun moduan, kondentsatuaren Φ_0 uhin-funtzioaren propietateak aztertu nahi ditugu, transformazio Galilear bat egitean. Garrantzitsua da aipatzea, $|\Phi_0|^2$ dentsitatea uniformea izan arren, gure uhin-funtzioa ez da inbariante bat izango transformazio Galilear batekiko fase bat gehitu beharko diogulako. Fase honen kalkulua egiteko erabili dezakegu Ekuazioa 1. Erreza da baieztagoera

$$\hat{\Phi}' = \hat{\Phi}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\mathbf{v}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}mv^2t \right) \right], \quad (32)$$

non \mathbf{v} bektore konstante bat den, soluzio bat dela. Hau da eremu eragilearen transformazio Galilearra. ordena-parametroa eta bere itxarotako balio izango dute transformazio berbera.

```
{< include SIMULACION/simulacion.qmd >}
```

Pitaevskii, Lev, eta Sandro Stringari. 2016. *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*. Oxford University Press. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001>.