

Poznámky k BEC článkům

5. května 2021

1 Bose-Einsteinův kondenzát - BEC

Pro spin $F = I + J$, - spin jádra a obalu. Pro $F = 1$ zavádíme tři sadu kreačních a anihilačních operátorů \hat{a}_0, \hat{a}_\pm

Hamiltonián kondenzátu

$$\begin{aligned} \hat{H} = & g \left\{ \left(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 \right) + \hat{N}_0 \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_{-1} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left(\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1} \right)^2 \right\} + q \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_{-1} \right) \\ & + \frac{r}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_{-1}^\dagger \right) \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \left(\hat{a}_1 + \hat{a}_{-1} \right) \right\} \end{aligned}$$

Ten odpovídá hybnostní reprezentaci vibronového hamiltoniánu s algebrou $(\hat{R}_+, \hat{R}_-, \hat{l})$ v řetězci.

$$\frac{1}{2}(\hat{R}_+ \hat{R}_- + \hat{R}_- \hat{R}_+) + \hat{l}^2 = 2(\tau_+^\dagger \tau_-^\dagger \sigma \sigma + N_+ N_\sigma + N_- N_\sigma + \tau_+ \tau_- \sigma^\dagger \sigma^\dagger) + \mathbf{2N} - \mathbf{n} + (N_+ - N_-)^2$$

$$\hat{H}_{\text{vibron}} = \frac{g}{2} \hat{W}^2(\hat{R}_+, \hat{R}_-, \hat{l}) - \frac{g}{2}(\mathbf{2N} - \mathbf{n}) + q\hat{n} + \frac{r}{\sqrt{2}}(\hat{R}_+ + \hat{R}_-)$$

Bez konstanty N tak máme

$$\hat{H}_{\text{vibron}} = (q + \frac{g}{2})\hat{n} + \frac{g}{2} \hat{W}^2(\hat{R}_+, \hat{R}_-, \hat{l}) + \frac{r}{\sqrt{2}}(\hat{R}_+ + \hat{R}_-)$$

q, g, r jsou parametry interakce daných bosonových atomů (na experiment Rubidium 87).

2 Rozdíl mezi $\hat{H}(\hat{D}_\pm)$ a $\hat{H}(\hat{R}_\pm)$

Zajímá nás rozdíl ve vlastnostech operátorů

$$\hat{H}_D = (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \left(\frac{1}{2}(\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+) + \hat{l}^2 \right) - \frac{\epsilon}{2}(\hat{D}_+ + \hat{D}_-) = (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \hat{W}_D^2 - \epsilon \hat{D}_x$$

a

$$\hat{H}_R = (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \left(\frac{1}{2}(\hat{R}_+ \hat{R}_- + \hat{R}_- \hat{R}_+) + \hat{l}^2 \right) - \frac{\epsilon}{2}(\hat{R}_+ + \hat{R}_-) = (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \hat{W}_R^2 - \epsilon \hat{R}_x,$$

kde W^2 je Cassimířův operátor algeber $O(3)$ (D_\pm, l) resp., (R_\pm, l) .

$$\hat{D}_+ = (\hat{D}_-)^\dagger = \sqrt{2}(\tau_+^\dagger \sigma - \sigma^\dagger \tau_-)$$

$$\hat{R}_+ = (\hat{R}_-)^\dagger = \sqrt{2}(\tau_+^\dagger \sigma + \sigma^\dagger \tau_-)$$

Ještě zavedeme

$$n = n_+ + n_-, \quad l = n_+ - n_-,$$

což plyne z

$$\hat{n} = \tau_+^\dagger \tau_+ + \tau_-^\dagger \tau_-, \quad \hat{l} = \tau_+^\dagger \tau_+ - \tau_-^\dagger \tau_-,$$

kde n_\pm jsou vlastní hodnoty operátorů $\tau_\pm^\dagger \tau_\pm$.

2.1 Symetrie $l \rightarrow -l$

Symetrie $l \rightarrow -l$ odpovídá záměně $\tau_+ \leftrightarrow \tau_-$ v hamiltoniánu. Tuto symetrii má dvojice operátorů \hat{R}_\pm

$$\hat{R}_+ \leftrightarrow \hat{R}_-,$$

ale ne \hat{D}_\pm

$$\hat{D}_+ \leftrightarrow -\hat{D}_-.$$

Tuto symetrii tak má celý hamiltonián H_R , ale jen bezporuchový hamiltonián $H_{D0} \rightarrow \hat{n} + \hat{W}_D^2$, protože \hat{W}_D^2 je kvadratický v \hat{D}_\pm .

Zajímavé je

$$(\hat{D}_+ + \hat{D}_-) \leftrightarrow -(\hat{D}_+ + \hat{D}_-),$$

$$(\hat{D}_+ - \hat{D}_-) \leftrightarrow (\hat{D}_+ - \hat{D}_-),$$

$$(\hat{R}_+ + \hat{R}_-) \leftrightarrow (\hat{R}_+ + \hat{R}_-),$$

$$(\hat{R}_+ - \hat{R}_-) \leftrightarrow -(\hat{R}_+ - \hat{R}_-),$$

protože $(\hat{D}_+ - \hat{D}_-)$ by měl být úměrný operátoru \hat{D}_y a tento operátor by symetrii $l \rightarrow -l$ mít měl. Ukážeme, že $l \rightarrow -l$ je symetrií hamiltoniánu, ale ne toho fyzikálního problému, takže se neodrazí ve spektru.

Není podstatné, jestli bereme bezporuchový hamiltonián \hat{H}_{D0} nebo \hat{H}_{R0} , protože oba mají symetrii $l \rightarrow -l$. Budeme tak obecně mluvit o H_0

$$\hat{H}_0 |N, n, l\rangle = f_{nl}^{(0)} |N, n, l\rangle + f_{nl}^{(+2)} |N, n+2, l\rangle + f_{nl}^{(-2)} |N, n-2, l\rangle,$$

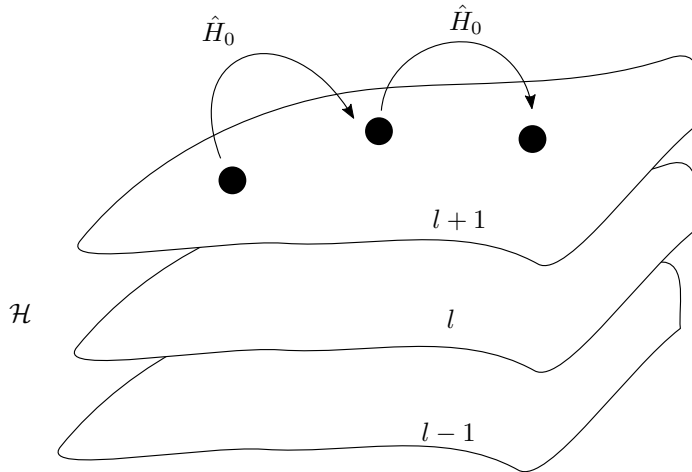
pro který ze symetrie $l \rightarrow -l$ platí

$$f_{nl}^{(0)} = f_{n-l}^{(0)}, \quad f_{nl}^{(+2)} = f_{n-l}^{(+2)}, \quad f_{nl}^{(-2)} = f_{n-l}^{(-2)}$$

Platí $H_0 = c_1 n + c_2 W^2$ a $[n, l] = [W^2, l] = 0$, tedy $[H_0, l] = 0$.

$$\hat{l} \hat{H}_0 |E^{(i)}\rangle = \hat{H}_0 \hat{l} |E^{(i)}\rangle = l(E^{(i)}) \hat{H}_0 |E^{(i)}\rangle$$

\hat{H}_0 tak nemíchá podprostory s různým l a navíc nemíchá lichá a sudá n . Platí $l = \pm n, \pm(n-2), \dots$, takže nemíchání sudých a lichých n není další symetrie, ale jen důsledek zachování l .



Hilbertův prostor \mathcal{H} rozdělený na podprostory hamiltoniánu $H_0 \rightarrow n + W^2$

Odtud tedy plyne, že spektrum H_0 bude obsahovat duplety:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |E_l\rangle &= E_l |E_l\rangle \\ |E_l\rangle &= \sum_n c_{nl} |N, n, l\rangle \\ E_l &= \langle E_l | \hat{H}_0 |E_l\rangle = \sum_n c_{nl} \left[f_{nl}^{(0)} + f_{nl}^{(+2)} + f_{nl}^{(-2)} \right],\end{aligned}$$

což plyne z ortogonalitavy stavů $|Nnl\rangle$.

Vytvoříme nový vektor z podprostoru $-l$ se stejnými koeficienty

$$|E_{-l}\rangle = \sum_n c_{nl} |N, n, -l\rangle,$$

pro který ale z ortogonalitavy stavů $|Nnl\rangle$ plyne

$$\langle E_l | |E_{-l}\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |E_{-l}\rangle &= \sum_n c_{nl} \hat{H}_0 |N, n, -l\rangle = \sum_n c_{nl} \left[f_{n-l}^{(0)} |N, n, -l\rangle + f_{n-l}^{(+2)} |N, n+2, -l\rangle + f_{n-l}^{(-2)} |N, n-2, -l\rangle \right] \\ &\quad \left/ \text{ze symetrie } f_{nl} = f_{n-l} \right/ = \\ &= \sum_n c_{nl} \left[f_{nl}^{(0)} |N, n, -l\rangle + f_{nl}^{(+2)} |N, n+2, -l\rangle + f_{nl}^{(-2)} |N, n-2, -l\rangle \right]\end{aligned}$$

Tedy

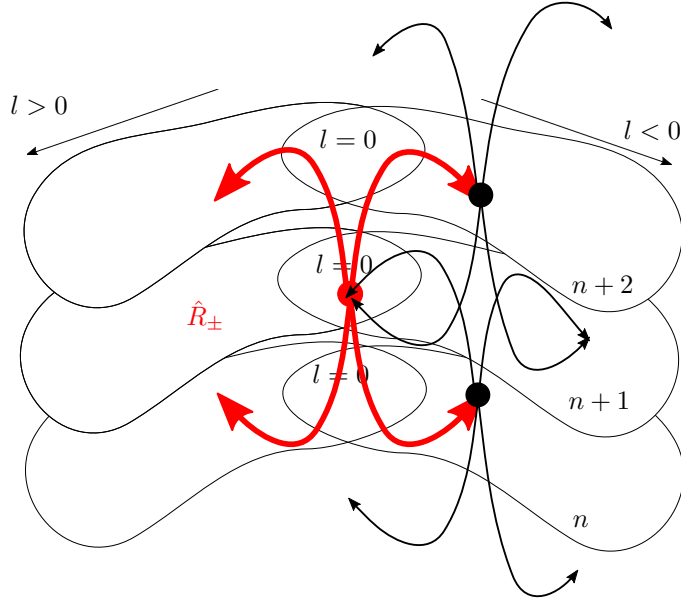
$$E_{-l} = \langle E_l | \hat{H}_0 |E_l\rangle = \sum_n c_{nl} \left[f_{nl}^{(0)} + f_{nl}^{(+2)} + f_{nl}^{(-2)} \right]$$

A protože se jedná o kolmé vlastní vektory, máme duplet

$$E_{-l} = E_l.$$

Operátor R_x (a obdobně D_y) tyto symetrie spektra narušuje.

$$\begin{aligned}\hat{R}_x |Nnl\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{R}_+ + \hat{R}_-) |Nnl\rangle \\ &= f_{nl}^{(+1+1)} |Nn+1l+1\rangle + f_{nl}^{(+1-1)} |Nn+1l-1\rangle + f_{nl}^{(-1+1)} |Nn-1l+1\rangle + f_{nl}^{(-1-1)} |Nn-1l-1\rangle\end{aligned}$$



Hilbertův prostor \mathcal{H} rozdělený na podprostory s naznačeným působením operátoru R_{\pm}

Narušení degenerace spektra u R_x je způsobena tím, že \hat{l} s ním nekomutuje. Nemůžeme tak zopakovat postup jako u \hat{H}_0 . Ukážeme to pro $\hat{H}_0 + R_x$

$$(\hat{H}_0 + \hat{R}_x) |E^{(i)}\rangle = E^{(i)} |E^{(i)}\rangle$$

$$|E^{(i)}\rangle = \sum_{n,l} c_{nl} |N, n, l\rangle$$

$$(\hat{H}_0 + \hat{R}_x) |E^{(i)}\rangle = \sum_{n,l} (\hat{H}_0 + \hat{R}_x) c_{nl} |N, n, l\rangle = \sum_n \hat{H}_0 c_n |N, n, l\rangle + \sum_{n,l} \hat{R}_x c_{nl} |N, n, l\rangle$$

Původní symetrie $l \rightarrow -l$ se kvůli promíchání Hilbertova prostoru neprojeví na spektru, neboť neplatí pro celý výraz

$$\sum_n \hat{H}_0 c_n |N, n, l\rangle \leftrightarrow \sum_n \hat{H}_0 c_n |N, n, -l\rangle$$

$$\hat{R}_x |N, n, l\rangle \leftrightarrow \hat{R}_x |N, n, -l\rangle,$$

ale

$$c_{nl} \xrightarrow{\tau_+ \leftrightarrow \tau_+} c_{n-l}.$$

Kvůli tomu, že $l = \text{const.}$ nejsou oddělené podprostory u R_x , nemají vlastní vektory nutně zdvojenou strukturu, navzdory symetrii $l \rightarrow -l$.

Tedy symetrie $l \rightarrow -l$ je symetrií problému jen, pokud l je dobré kvantové číslo (l komutuje s hamiltoniánem).

Operátory $\hat{D}_{x,y}$ a $\hat{R}_{x,y}$ tak skutečně narušují degeneraci spektra.

2.2 Spektrum a záměna znaménka u \hat{a} a \hat{a}^\dagger

Naše hamiltoniány H_D (vibronový model řetězové molekuly od Iachella) a H_R (hamiltonián 2-2 interakcí v BE kondenzátu) se liší jen ve znaménku sady operátorů τ_- . Tedy

$$(H_D, \tau_-) = (H_R, -\tau_-).$$

Ukážeme, že spektrum hamiltoniánu po druhém kvantování nezáleží na znaménku sady kreačních a ani-hilačních operátorů. Jeho změna však mění bázi vlastních vektorů.

V našem případě, kdy máme tři sady σ, τ_\pm a celkový počet bosonů N se nemění, nás bude zajímat změna spektra po $\tau_- \rightarrow -\tau_-$. Místo báze $|Nnl\rangle$ budeme požívat $|ij\rangle$, kde $i = n, j = l$.

Hamiltonián s kladným τ_- označíme \hat{H}^+ .

$$\hat{H}^+ = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ij i'j'} |ij\rangle \langle i'j'| = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ij i'j'} \underbrace{\sigma^\dagger \dots}_{N-i-j} \underbrace{\tau_+^\dagger \dots}_i \underbrace{\tau_-^\dagger \dots}_j |0\rangle \langle 0| \underbrace{\sigma \dots}_{N-i'-j'} \underbrace{\tau_+ \dots}_i \underbrace{\tau_- \dots}_j$$

Jeho spektrum je

$$|E^{(i)}\rangle = \sum_{kl} \varepsilon_{kl} |kl\rangle$$

$$E^{(i)} = \langle E^{(i)} | \hat{H}^+ | E^{(i)} \rangle = \sum_{klk'l'} \sum_{ij i'j'} \bar{\varepsilon}_{k'l'} \varepsilon_{kl} c_{ij i'j'} \langle k'l' | ij \rangle \langle i'j' | kl \rangle$$

Fockovské stavy jsou ortogonální $\langle k'l' | ij \rangle = \delta_{k'i} \delta_{l'j}$, takže

$$E^{(i)} = \sum_{ij i'j'} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{ij i'j'}.$$

Tedy zaměníme znaménka u τ_- a τ_-^\dagger na mínus

$$\hat{H}^- = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ij i'j'} (-1)^j (-1)^{j'} \underbrace{\sigma^\dagger \dots}_{N-i-j} \underbrace{\tau_+^\dagger \dots}_i \underbrace{\tau_-^\dagger \dots}_j |0\rangle \langle 0| \underbrace{\sigma \dots}_{N-i'-j'} \underbrace{\tau_+ \dots}_i \underbrace{\tau_- \dots}_j$$

$$\hat{H}^- = \sum_{ij} \sum_{i'j'} (-1)^{(j+j')} c_{ij i'j'} |ij\rangle \langle i'j'|$$

Na základě oscilujícího znaménka tipneme podobu vlastního vektoru (není to tip, prostě vykompenzujeme přidaná znaménka)

$$|E^{(i)-}\rangle = \sum_{kl} (-1)^l \varepsilon_{kl} |kl\rangle$$

$$E^{(i)-} = \langle E^{(i)-} | \hat{H}^- | E^{(i)-} \rangle = \sum_{klk'l'} \sum_{ij i'j'} \bar{\varepsilon}_{k'l'} \varepsilon_{kl} c_{ij i'j'} (-1)^{l'} (-1)^l (-1)^{(j+j')} \langle k'l' | ij \rangle \langle i'j' | kl \rangle$$

Opět z ortogonalit

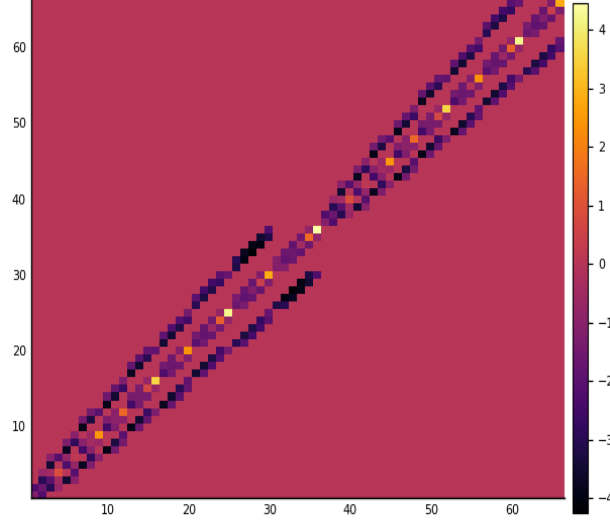
$$E^{(i)-} = \sum_{ij i'j'} (-1)^{(j+j')} (-1)^{(j+j')} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{ij i'j'} = \sum_{ij i'j'} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{ij i'j'} = E^{(i)}.$$

Tedy změna znaménka sady kre./an. operátorů nemění spektrum, ale mění vlastní bázi.

3 Blokově diagonální

Hamiltonián \hat{H}_R je blokově diagonální v bázi

$$\{|Nnl\rangle, |Nn-l\rangle\} \rightarrow \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(|Nnl\rangle + |Nn-l\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|Nnl\rangle - |Nn-l\rangle) \right\}.$$



V této bázi ale \hat{H}_D blokově diagonálně není, neboť

$$\begin{aligned} \hat{H}_D^{(Nnl)} &= U_D \hat{H}_D^{(\text{diagonální})} U_D^{-1} = U_D \hat{H}_R^{(\text{diagonální})} U_D^{-1} \\ \hat{H}_R^{(Nnl)} &= S \hat{H}_D^{(\text{blokově diagonální})} S^{-1} = SU \hat{H}_R^{(\text{diagonální})} U^{-1} S^{-1} = SU \hat{H}_D^{(\text{diagonální})} U^{-1} S^{-1} = SUU_D^{-1} \hat{H}_D^{(Nnl)} U_D U^{-1} S^{-1} \end{aligned}$$

Tedy

$$\hat{H}_D^{(\text{blokově diagonální})} = UU_D^{-1} \hat{H}_D^{(Nnl)} U_D U^{-1}.$$

Vibronový hamiltonián je tak blokově diagonální v bázi $U_D U^{-1}$ (její podoba je závislá na parametrech hamiltoniánu).

3.1 Blokově diagonální \hat{H}_D

Bázi $\{|nl\rangle \pm |n-l\rangle\}$ označíme jako $|nl\pm\rangle$. Působení interakčních operátorů je

$$\begin{aligned} \hat{R}_x |nl\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sigma \left(\sqrt{\frac{n+j}{2}} + 1 |(n+1)(l+1)\pm\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} + 1 |(n+1)(l-1)\pm\rangle \right) \right. \\ &\quad \left. + \sigma^\dagger \left(\sqrt{\frac{n+j}{2}} |(n-1)(l-1)\pm\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} |(n-1)(l+1)\pm\rangle \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{D}_x |nl\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sigma \left(\sqrt{\frac{n+j}{2}} + 1 |(n+1)(l+1)\mp\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} + 1 |(n+1)(l-1)\mp\rangle \right) \right. \\ &\quad \left. + \sigma^\dagger \left(\sqrt{\frac{n+j}{2}} |(n-1)(l-1)\mp\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} |(n-1)(l+1)\mp\rangle \right) \right] \end{aligned}$$

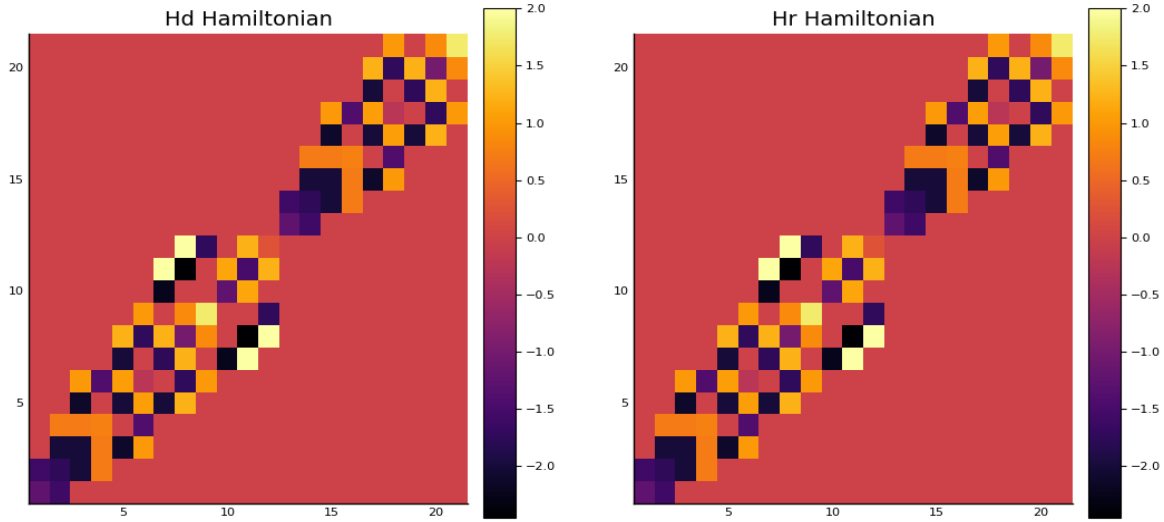
Operátor \hat{R}_x tedy nemíchá kladný $|nl+\rangle$ a záporný podprostor $|nl-\rangle$, zatímco \hat{D}_x ano.

Kvantová čísla n, l , která číslují stavy $|Nnl\rangle$, mohou být ve stavu obě sudá, nebo obě lichá. Pokud alternování sudosti a lichosti spojíme s alternováním znaménka \pm stavu $|nl\pm\rangle$, dostaneme invariantní podprostory pro operátor \hat{D}_x .

Operátor \hat{D}_x je tedy blokově diagonální ve stejné bázi, jen musíme vektory přeuspořádat. Operátor \hat{D}_x je blokově diagonální v podprostorech

$$1. \text{ podprostor} = \{|nl+\rangle_{n,l - \text{sudé}}, |nl-\rangle_{n,l - \text{liché}}\}$$

$$2. \text{ podprostor} = \{|nl+\rangle_{n,l - \text{liché}}, |nl-\rangle_{n,l - \text{sudé}}\}$$



Vidíme, že první podprostor je větší, protože obsahuje stavy $|Nnl=0\rangle$ - odpovídají sudému l a $|l\rangle + |-l\rangle$. Pokud bychom je odebrali, oba bloky vypadají identicky.

4 Závěr

Operátory $\hat{D}_{x,y}$ a $\hat{R}_{x,y}$ ruší degeneraci spektra a hamiltoniány H_D (Iachello) a H_R (Bose-Einsteinův kondenzát) mají stejná spektra, ale odlišné vlastní báze.