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.

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

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

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 Cassimírův 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

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

což plyne z

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

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

2.1 Symetrie $l \to -l$

Symetrie $l \to -l$ 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 $H_{D0} \to \hat{n} + \hat{W}_D^2$, 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 $l \to -l$ mít měl. Ukážeme, že $l \to -l$ 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 $l \to -l$. Budeme tak obecně mluvit o H_0

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

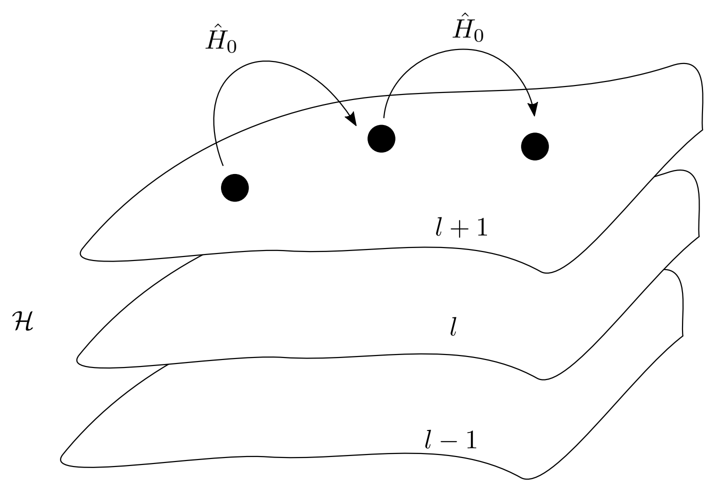
pro který ze symetrie $l \to -l$ platí

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

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

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

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



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

Odtud tedy plyne, že spektrum H_0 bude obsahovat duplety:

$$\hat{H}_0 \left| E_l \right\rangle = E_l \left| E_l \right\rangle$$

$$\left| E_l \right\rangle = \sum_n c_{nl} \left| N, n, l \right\rangle$$

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

což plyne z ortogonality stavů $\left| Nnl \right\rangle$.

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

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

pro který ale z ortogonality stavů $\left| Nnl \right\rangle$ plyne

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

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

Tedy

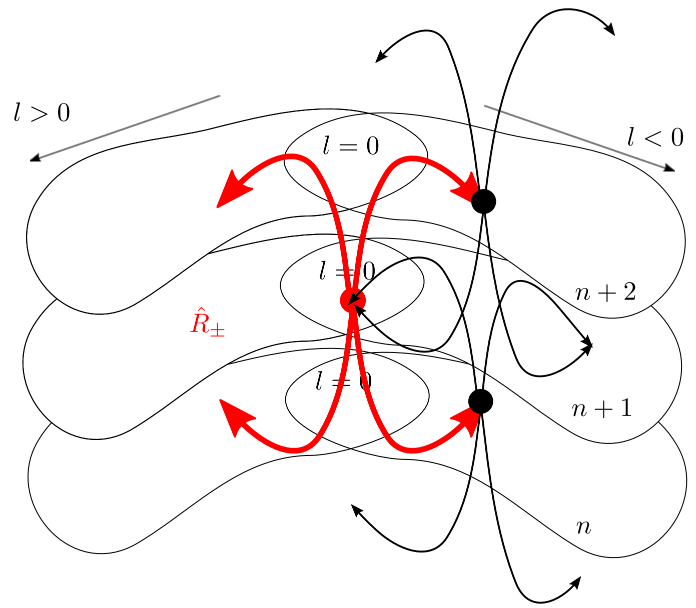
$$E_- l = \left\langle E_l \right| \hat{H}_0 \left| E_l \right\rangle = \sum_n c_{nl} \left[f_{nl}^{(0)} + f_{nl}^{(+2)} + f_{nl}^{(-2)} \right]$$

A protože se jedná o kolmé vlastní vektory, máme duplet

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

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

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



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 $l \to -l$ 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

$$c_{nl} \overset{\tau_+ \leftrightarrow \tau_+}{\not\longleftrightarrow} c_{n-l} .$$

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

Tedy symetrie $l \to -l$ 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 řetízkové 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 anihilačních operátorů. Jeho změna však mění bázi vlastních vektorů.

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

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

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

Jeho spektrum je

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

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

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

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

Teď zaměníme znaménka u τ_- a $\tau_-^\dagger$ na mínus

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

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

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

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

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

Opět z ortogonality

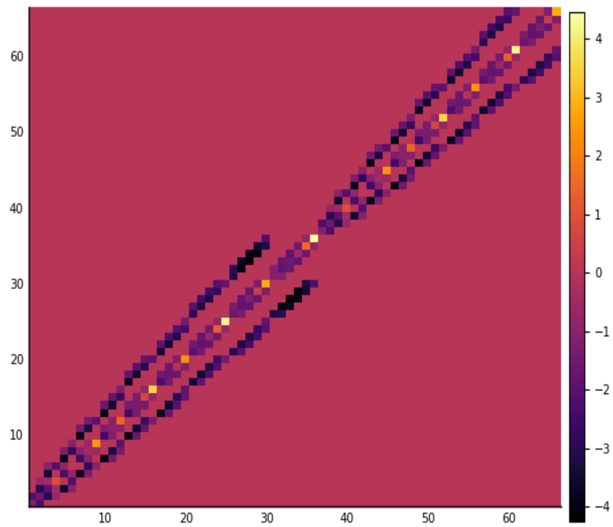
$$E^{(i)-} = \sum_{iji'j'} (-1)^{(j+j')} (-1)^{(j+j')} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{iji'j'} = \sum_{iji'j'} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{iji'j'} = E^{(i)}.$$

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

$$\{|Nnl\rangle\,, |Nn-l\rangle\,, |Nn0\rangle\} \to \{\frac{1}{\sqrt{2}}(|Nnl\rangle + |Nn-l\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|Nnl\rangle - |Nn-l\rangle), |Nn0\rangle\}.$$



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

$$\hat{H}_D^{(Nnl)} = U_D \hat{H}_D^{(\text{diagonální})} U_D^{-1} = U_D \hat{H}_R^{(\text{diagonální})} U_D^{-1}$$

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

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).

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.