

ASSIGNMENT 1: Weakly interacting and confined bosons at low density.

A0) Using the GP program check that if you put the interaction equal to zero, then you recover the expected results for the harmonic oscillator. Why the energy per particle is equal to the chemical potential?

Quan fem zero el terme d'interacció dins la equació de GP el que obtenim és:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{2}r_1^2\right]\bar{\Psi}(\vec{r}_1) = \mu\bar{\Psi}(\vec{r}_1)$$

Que no és més que la equació de Schrödinger per a una partícula atrapada en una trampa harmònica. Donada l'estructura d'equació de valors propis, sabem que μ és valor propi de l'operador $\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{2}r_1^2\right]$, que no és més que l'operador Hamiltonià de l'oscil·lador harmònic. En el context de l'equació de GP, μ representa el potencial químic. En aquest cas particular sense interacció en el que recuperem els resultats de l'oscil·lador harmònic, μ representa un valor propi de l'operador Hamiltonià, és a dir, una energia de l'espectre d'energies. Per aquest motiu, el que podem esperar un cop executada la simulació, és que la energia total del sistema (valor propi de l'hamiltonià) i el potencial químic, siguin iguals. En unitats d'oscil·lador harmònic:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = n + \frac{1}{2}$$

A més, a partir del teorema del Virial:

$$E_{kin} = E_{pot} = \frac{1}{2}E$$

L'output de la simulació resulta:

```
Energy = 1.4999665803922508, Average chemical = 1.4999665800447375,  
Kinetic Energy = 0.7488594272777901, Potential = 0.751107152766917,  
Harmonic Potential = 0.751107152766917, Self-Interaction Potential  
= 0.0
```

Observem que de manera aproximada $E = \mu \approx 3/2$, $E_{kin} \approx 3/4$, $E_{pot} \approx 3/4$. Els resultats obtinguts coincideixen amb un sistema en el que tots els àtoms es troben al primer estat excitat ($n=1$). Tal i com està plantejada la solució a l'equació, el que s'esperaria seria tenir cada àtom del sistema en l'estat de menor energia, és a dir l'estat fonamental en el que esperàriem $E = \mu \approx 1/2$, $E_{kin} \approx 1/4$, $E_{pot} \approx 1/4$. Aquests resultats poden haver-se donat per l'elecció dels paràmetres que dicten la convergència. En qualsevol cas hem pogut veure que efectivament quan hem cancel·lat el terme interactiu dins l'equació GP, hem recuperat els resultats que esperàvem per l'oscil·lador harmònic.

La raó física darrere del fet de que l'energia total del sistema és igual al potencial químic, resideix en la no interacció dels àtoms del condensat, per aquest motiu, afegir una nou àtom al condensat, només suposa un cost igual a la energia de l'estat que l'àtom ocuparà. Per definició, el potencial químic en un BEC és l'energia necessària per a afegir una nou àtom, de manera que veiem que en el context en el que els àtoms no interactuen, l'energia de l'estat que ocupa l'àtom i el potencial químic, han de ser iguals.

Una observació interessant és que el fet de negligir el terme interactiu de la equació de GP, elimina la dependència en el nombre d'àtoms de les energies per partícula, per això podem veure a la simulació com canviar el nombre d'àtoms N (aa al codi) no canvia els resultats.

A) Take $\bar{a}_s = 0.00433$, appropriate for ^{87}Rb and, using the program, solve the GP equation. Study the dependence on the number of particles of the chemical potential, and the following energies per particle: total, kinetic, harmonic oscillator and interaction energy. Construct a table with the results and comment their behavior.

N	μ	E	Kinetic	Harmonic	Interaction
100	1.7874	1.6519	0.6561	0.8604	0.1355
1000	3.0445	2.4247	0.4375	1.3674	0.6198
10000	6.8658	5.0415	0.2403	2.9768	1.8243
100000	16.8466	12.1039	0.1237	7.2376	4.7426
1000000	42.1192	30.1201	0.0612	18.0597	11.9991

Podem veure que a mesura que N creix, el potencial químic, el potencial harmònic i el potencial d'interacció creixen mentre que l'energia cinètica decreix. Observem que la energia total també creix amb N . És evident que el potencial d'interacció ha de créixer amb N ja que el nombre d'interaccions augmenta quan el nombre d'àtoms augmenta. Per tal de minimitzar el potencial d'interacció, el condensat s'expandeix, ara els àtoms es troben més allunyats del centre de la trampa, de manera que augmenta la energia potencial harmònica. El potencial químic representa la energia necessària per a afegir un àtom més al condensat, aquest presenta dues contribucions principals (a N prou gran) que són la del potencial d'interacció (col·locar un nou àtom en una regió amb àtoms n'incrementa el potencial d'interacció) i el potencial harmònic (el BEC s'estén), com ambdues contribucions creixen amb N , el potencial químic també. El valor esperat de la energia cinètica presenta la dependència $\sim \int |\nabla\Psi|^2 d^3r$, quan N creix i el BEC s'expandeix, la funció d'ona canvia menys abruptament o més gradualment al llarg de l'espai, resultant en gradients més reduïts. L'energia total conté les contribucions cinètica, harmònica i interactiva, de manera que observem que creix amb N . S'hauria d'estudiar la possibilitat de que l'elecció dels paràmetres que caracteritzen el BEC pogués permetre que, tot i que el decreixement de la energia cinètica acostuma a ser més lent que els creixements dels altres termes, l'energia total decreixes amb N .

B) Do the same thing using the Thomas-Fermi approximation. Notice that the kinetic energy in this approach is taken to 0.

N	μ	E	Kinetic	Harmonic	Interaction
100	1.0377	0.7647	0.000	0.4917	0.2730
1000	2.6405	1.8984	0.000	1.1562	0.7421
10000	6.6598	4.7634	0.000	2.8669	1.8964
100000	16.7454	11.9640	0.000	7.1826	4.7814
1000000	42.0714	30.0520	0.000	18.0326	12.0194

Podem veure que els resultats quan eliminem el terme cinètic de la equació de GP són els esperats. Veiem que la columna d'energia cinètica és completament nul·la ja que estem negligint el terme associat a aquesta contribució. D'altra banda podem observar com en els casos en els que la N és molt gran, les energies trobades s'apropen molt als resultats del cas anterior associat a la solució de GP sense aproximacions. Això només es deu a que com hem pogut veure a l'apartat A), l'energia cinètica decreix amb N, específicament en el darrer cas (major N) hem pogut veure com l'energia cinètica era negligible comparada amb les altres contribucions a l'energia total. Podem veure com la darrera fila de la taula A) i la B) són pràcticament idèntiques.

C) Make a plot of the density profile $\rho(r_1)$ normalized such that $\int dr_1 r_1^2 \rho(r_1) = 1$ for N=1000 and N=100000 and compare the GP and the TF results.

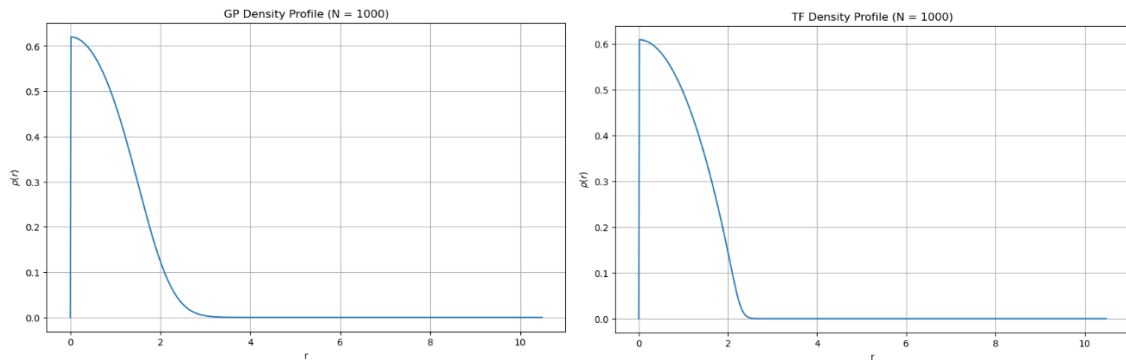


Figura 1. Comparativa dels perfils de la densitat GP (esquerra) i TF (dreta) per a N=1000.

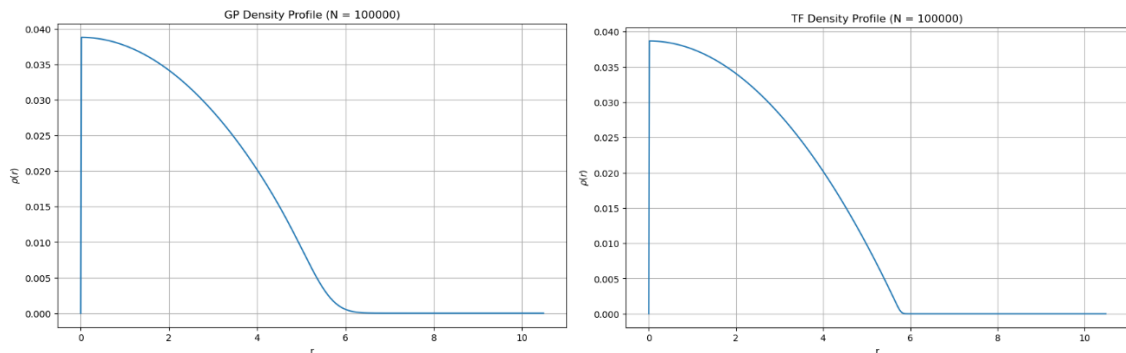


Figura 2. Comparativa dels perfils de la densitat GP (esquerra) i TF (dreta) per a N=100000.

A la figura 1 podem veure com el perfil de densitat del BEC resolt amb la aproximació TF representa un sistema més confinat que el resolt sense aproximació. Aquest fet es veu reflectit en una caiguda

de la densitat molt més abrupta en un valor de r menor, quan comparat amb la situació sense aproximació TF, i un pic major a $r = 0$. Fent la comparativa amb una N menor, poden observar-se aquestes característiques més acuradament:

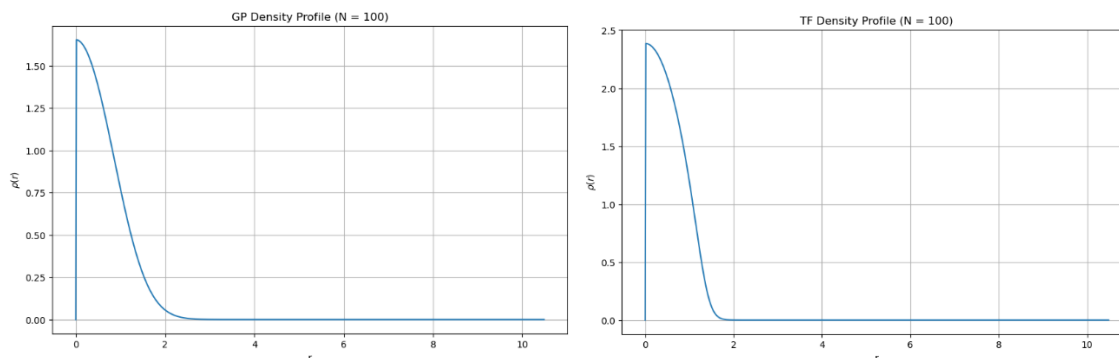


Figura 3. Comparativa dels perfils de la densitat GP (esquerra) i TF (dreta) per a $N=100$.

A la figura 2 en canvi, veiem com el perfil de la densitat obtingut amb l'aproximació de TF i el trobat sense aproximació són pràcticament idèntics, tal i com podíem esperar gràcies a l'estudi d'energies que hem fet a l'apartat anterior. Tot i això podem seguir observant l'efecte anterior estudiant la densitat a la regió més externa del BEC, on veiem que el BEC obtingut sense l'aproximació de TF té una caiguda de densitat més suau.

Finalment, comparant els perfils amb $N=1000$ i amb $N=100000$ observem com el BEC s'estén espacialment per motius de minimitzar les interaccions entre àtoms tal i com hem discutit a l'apartat anterior.

D) Check numerically that the solutions of the GP equation fulfil de virial theorem for different values of N

Sabem que podem esperar que les diferents energies trobades resolent l'equació de GP satisfacin el teorema del Virial:

$$2E_{kin} - 2E_{harmonic} + 3E_{int} = 0$$

Degut a que l'equació de GP està dissenyada per a sistemes de molts bosons, esperem un major grau de precisió en sistemes de N molt grans, de manera que si calculem el valor absolut del Virial per diferents N , esperem trobar valors més propers a zero a mesura que fem créixer N . S'ha dut a terme el càlcul numèric i l'output ha estat:

```
N = 100: 2T - 2V_ext + 3V_int = -0.0022459829936993803
N = 1000: 2T - 2V_ext + 3V_int = -0.0003052079949599218
N = 10000: 2T - 2V_ext + 3V_int = -1.0038200962014798e-05
N = 100000: 2T - 2V_ext + 3V_int = 4.102288087892703e-06
N = 1000000: 2T - 2V_ext + 3V_int = 0.0003722607832443714
```

Podem veure com efectivament el valor absolut del Virial decreix amb N apropant-se cada cop més a zero. Amb N màxima trobem una discrepància ja que el virial no s'apropa tant a zero com esperàriem, podem associar aquest resultat a la selecció de paràmetres o al mètode de convergència.