

Statystyczne własności bozonów na okręgu

Maciej Kruk , Maciej Łebek

Centrum Fizyki Teoretycznej, Polska Akademia Nauk, Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warszawa, Polska

Wrzesień 2018

1 Suma statystyczna i $P(N_{ex})$ dla atomów na okręgu z uwzględnieniem degeneracji - przybliżenie pól klasycznych

Niech n - parametr obciążenia, $E_{-n}...E_0...E_n$ - energie własne potencjału (przesunięte tak, że wszystkie są dodatnie), N - liczba cząstek. Zespolone współczynniki klasycznego pola spełniają:

$$\sum_{j=-n}^n |\alpha_j|^2 = N$$

Suma statystyczna:

$$Z_N(\beta) = \int \frac{d^2\alpha_{-n}}{\pi} \dots \int \frac{d^2\alpha_n}{\pi} e^{-\beta \sum_{j=-n}^n E_j |\alpha_j|^2} \delta(N - \sum_{j=-n}^n |\alpha_j|^2)$$

Gdzie korzystamy z następującej reprezentacji funkcji delta:

$$\delta(N - \sum_{j=-n}^n |\alpha_j|^2) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi(N - \sum_{j=-n}^n |\alpha_j|^2)}$$

Co prowadzi do postaci:

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi N} \cdot I_{-n} \dots I_n$$

Gdzie

$$I_k = \int \frac{d^2\alpha_k}{\pi} e^{-|\alpha_k|^2(\beta E_k + i\xi)} = \frac{1}{\beta E_k + i\xi}$$

Uwzględniając degenerację energii własnych ($E_i = E_{-i}$)

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi N} \prod_{j=-n}^n \frac{1}{\beta E_j + i\xi} = (-1)^{n+1} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{i\xi N} \frac{1}{\xi - i\beta E_0} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(\xi - i\beta E_j)^2}$$

Aby obliczyć powyższą całkę rozważamy funkcję $f(z) := \frac{e^{izN}}{z - i\beta E_0} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(z - i\beta E_j)^2}$ i całkujemy ją po półokręgu zawierającym się w górnej połowie układu współrzędnych korzystając z twierdzenia o residuach (człon wynikający z całkowania po łuku znika przy przejściu z promieniem do nieskończoności).

Dla $z = i\beta E_0$ występuje biegun 1 rzędu.

$$\text{Res}_{z=i\beta E_0} f = (-1)^n e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(\beta E_0 - \beta E_j)^2}$$

Dla $z = i\beta E_k$, $k \neq 0$ jest biegun 2 rzędu.

$$\text{Res}_{z=i\beta E_k} f = \lim_{z \rightarrow i\beta E_k} \frac{d}{dz} (z - i\beta E_k)^2 f(z) \quad (1)$$

Aby obliczyć residuum w powyższym przypadku, będziemy różniczkować następujące wyrażenie:

$$\frac{e^{izN}}{z - i\beta E_0} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(z - i\beta E_j)^2}$$

Aby obliczyć pochodną iloczynu, korzystamy z następującego wzoru, zapisanego dla uproszczenia dla dowolnych funkcji $g_j(x)$.

$$\frac{d}{dx} \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n g_j(x) \right) = \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n g_j(x) \right) \left(\sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{g'_l(x)}{g_l(x)} \right) \quad (2)$$

Co prowadzi do wzoru:

$$\text{Res}_{z=i\beta E_k} f = (-1)^{n-1} \frac{e^{-\beta E_k N}}{\beta E_k - \beta E_0} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} + \frac{1}{\beta E_k - \beta E_0} \right)$$

W konsekwencji

$$\begin{aligned} \sum \text{Res} &= (-1)^n e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(\beta E_0 - \beta E_j)^2} + \\ &+ \sum_{k=1}^n \left[(-1)^{n-1} \frac{e^{-\beta E_k N}}{\beta E_k - \beta E_0} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} + \frac{1}{\beta E_k - \beta E_0} \right) \right] \end{aligned}$$

I z twierdzenia o residuach otrzymujemy sumę statystyczną:

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(\beta E_0 - \beta E_j)^2} \\ &- \sum_{k=1}^n \left[\frac{e^{-\beta E_k N}}{\beta E_k - \beta E_0} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} + \frac{1}{\beta E_k - \beta E_0} \right) \right] \end{aligned}$$

Aby obliczyć $P(N_{ex})$ korzystamy ze wzoru:

$$P(N_{ex}) = \frac{Z_{N_{ex}}}{Z_N} \quad (3)$$

gdzie $Z_{N_{ex}}$ jest sumą statystyczną dla sytuacji, gdy N_{ex} atomów jest wzbudzona, a $N_0 = N - N_{ex}$ obsadza stan podstawowy.

$$Z_{N_{ex}}(\beta) = \int \frac{d^2 \alpha_{-n}}{\pi} \dots \int \frac{d^2 \alpha_{-1}}{\pi} \int \frac{d^2 \alpha_1}{\pi} \dots \int \frac{d^2 \alpha_n}{\pi} e^{-\beta E_0 N_0} e^{-\beta \sum_{j \neq 0} E_j |\alpha_j|^2} \delta(N_{ex} - \sum_{\substack{j=-n \\ j \neq 0}}^n |\alpha_j|^2)$$

Sumę tą obliczamy używając dokładnie tych samych metod jak w przypadku obliczania Z_N . Otrzymujemy:

$$Z_{N_{ex}}(\beta) = e^{-\beta E_0 N_0} \sum_{k=1}^n e^{-\beta E_k N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N_{ex} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} \right)$$

Stąd otrzymujemy wzór na $P(N_{ex})$:

$$P(N_{ex}) = \frac{e^{-\beta E_0 N_0} \sum_{k=1}^n e^{-\beta E_k N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N_{ex} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} \right)}{e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^n \frac{1}{(\beta E_0 - \beta E_j)^2} - \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\beta E_k N}}{\beta E_k - \beta E_0} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(\beta E_k - \beta E_j)^2} \left(N + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{\beta E_k - \beta E_l} + \frac{1}{\beta E_k - \beta E_0} \right)}$$

Wzór ten można uprościć, korzystając z faktu, że $E_k = k^2 \epsilon + \text{const}$, gdzie ϵ jest energią pierwszego stanu wzbudzonego, a const - stałą przesunięcia gwarantującą dodatniość wszystkich energii. Definiujemy bezwymiarowe $\gamma = \beta \epsilon$.

$$P(N_{ex}) = \frac{\gamma^2 \sum_{k=1}^n e^{-\gamma k^2 N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(k^2 - j^2)^2} \left(N_{ex} + \frac{2}{\gamma} \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{k^2 - l^2} \right)}{\frac{1}{n!^4} - \gamma \sum_{k=1}^n \frac{e^{-\gamma k^2 N}}{k^2} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{1}{(k^2 - j^2)^2} \left(N + \frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{k^2} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^n \frac{1}{k^2 - l^2} \right) \right)} \quad (4)$$

2 Suma statystyczna i $P(N_{ex})$ dla atomów na okręgu z uwzględnieniem degeneracji - ściśle

Rozważamy N atomów, $E_{-\infty}, \dots, E_0, \dots, E_{\infty}$ - energie własne potencjału (wszystkie dodatnie). Niech n_i to obsadzenie i -tego poziomu energetycznego. Wtedy suma statystyczna:

$$Z_N(\beta) = \sum_{n_{-\infty}=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{\infty}=0}^{\infty} e^{-\beta(\sum_{j=-\infty}^{\infty} E_j n_j)} \delta_{N, \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j}$$

Wykorzystujemy reprezentację delty Kroneckera:

$$\delta_{N, \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi e^{i\xi(N - \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j)}$$

Zamieniając całkowanie i sumowanie kolejnością, jesteśmy w stanie obliczyć sumy, które są sumami ciągów geometrycznych.

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi e^{i\xi N} \prod_{j=-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-(i\xi + \beta E_j)}}$$

Energie własne są zdegenerowane ($E_i = E_{-i}$)

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi \frac{e^{i\xi N}}{1 - e^{-(i\xi + \beta E_0)}} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-(i\xi + \beta E_j)})^2} \quad (5)$$

Obliczanie tej całki można zamienić na całkowanie funkcji $h(z) = \frac{z^N}{z - e^{-\beta E_0}} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{z^2}{(z - e^{-\beta E_j})^2}$ po okręgu jednostkowym.

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C(1)} dz \frac{z^N}{z - e^{-\beta E_0}} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{z^2}{(z - e^{-\beta E_j})^2} \quad (6)$$

Można sprawdzić że całka 6 przechodzi w całkę 5 przy zamianie zmiennych $z = e^{i\xi}$. Aby obliczyć powyższą całkę skorzystamy z twierdzenia o residuach. W $z = e^{-\beta E_0}$ biegun pierwszego rzędu.

$$\text{Res}_{z=e^{-\beta E_0}} h = e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_0)})^2}$$

W $z = e^{-\beta E_k}$, $k \neq 0$ biegun drugiego rzędu. Z wzoru 1 widać, że tym razem musimy różniczkować następujące wyrażenie

$$\frac{z^{N+2}}{z - e^{-\beta E_0}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{z^2}{(z - e^{-\beta E_j})^2}$$

Korzystając z wzoru 2 na pochodną iloczynu obliczamy

$$\text{Res}_{z=e^{-\beta E_k}} h = \frac{e^{-\beta E_k N}}{1 - e^{-\beta(E_0 - E_k)}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_k)})^2} \left[N + 1 + \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_0)}} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_l)}} \right]$$

Z twierdzenia o residuach, suma statystyczna wynosi:

$$\begin{aligned} Z_N(\beta) &= e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_0)})^2} \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\beta E_k N}}{1 - e^{-\beta(E_0 - E_k)}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_k)})^2} \left[N + 1 + \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_0)}} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_l)}} \right] \end{aligned}$$

Aby obliczyć $P(N_{ex})$ znów korzystamy z 3. $Z_{N_{ex}}$ wynosi:

$$Z_{N_{ex}}(\beta) = \sum_{n_{-\infty}=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{-1}=0}^{\infty} \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_{\infty}=0}^{\infty} e^{-\beta E_0 N_0} e^{-\beta(\sum_{j \neq 0} E_j n_j)} \delta_{N_{ex}, \sum_{j \neq 0} n_j}$$

Zamieniając całkowanie i sumowanie kolejnością i wykonując sumy otrzymujemy:

$$Z_{N_{ex}} = e^{-\beta E_0 N_0} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi e^{i\xi N_{ex}} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-(i\xi + \beta E_j)})^2}$$

Powyższą całkę ponownie zamieniamy na całkę z funkcji zespolonej po okręgu jednostkowym. W wyniku całkowania otrzymujemy:

$$Z_{N_{ex}} = e^{-\beta E_0 N_0} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta E_k N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_k)})^2} \left[N_{ex} + 1 + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_l)}} \right]$$

Stąd:

$$P(N_{ex}) = \frac{e^{-\beta E_0 N_0} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta E_k N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_k)})^2} \left(N_{ex} + 1 + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_l)}} \right)}{e^{-\beta E_0 N} \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_0)})^2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\beta E_k N}}{1 - e^{-\beta(E_0 - E_k)}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\beta(E_j - E_k)})^2} \left(N + 1 + \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_0)}} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - E_l)}} \right)}$$

Znowu możemy uprościć zapis powyższego wyrażenia wprowadzając $\gamma = \beta\epsilon$.

$$P(N_{ex}) = \frac{\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\gamma k^2 N_{ex}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{\gamma(k^2 - j^2)})^2} \left(N_{ex} + 1 + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\gamma(k^2 - l^2)}} \right)}{\prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{-\gamma j^2})^2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma k^2 N}}{1 - e^{-\gamma k^2}} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(1 - e^{\gamma(k^2 - j^2)})^2} \left(N + 1 + \frac{1}{1 - e^{-\gamma k^2}} + 2 \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\gamma(k^2 - l^2)}} \right)} \quad (7)$$

3 Typy oddziaływań

1. kontaktowe – $V(x, x') = g\delta(x - x')$,
2. gaussowskie – $V(x, x') = \frac{g}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-x'}{\sigma})^2}$,
3. dipol-dipol – $V(x, x') = \frac{g}{4l_{\perp}} (-2|\frac{x-x'}{l_{\perp}}| + e^{\frac{1}{2}|\frac{x-x'}{l_{\perp}}|^2} \sqrt{2\pi}(1 + |\frac{x-x'}{l_{\perp}}|^2) \text{Erfc}(|\frac{x-x'}{\sqrt{2}l_{\perp}}|))$, Wzór na oddziaływanie dipol-dipol jest znormalizowanym wzorem (4) z pracy [2].

Periodyczny odpowiednik oddziaływania $V(x, x')$ z okresem L ma postać

$$V_p(x, x') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V(x - Ln, x').$$

Wstawiając pole klasyczne do hamiltonianu w drugiej kwantyzacji otrzymujemy dla oddziaływania kontaktowego:

$$\frac{H}{\epsilon} = \sum_{j=-K_{max}}^{K_{max}} j^2 |\alpha_j|^2 + \frac{g}{2L\epsilon} \sum_{\substack{j_1, j_2, j_3, j_4 \\ j_1 + j_2 = j_3 + j_4}} \alpha_{j_1}^* \alpha_{j_2}^* \alpha_{j_3} \alpha_{j_4} \quad (8)$$

gdzie $\epsilon = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$ jest energią pierwszego stanu wzbudzonego. Definiujemy $\gamma = \frac{g}{2L\epsilon}$ jako miarę siły oddziaływania i $\beta = \frac{\epsilon}{k_B T}$ jako bezwymiarową odwrotną temperaturę. Dla oddziaływań dalekozasiegowych:

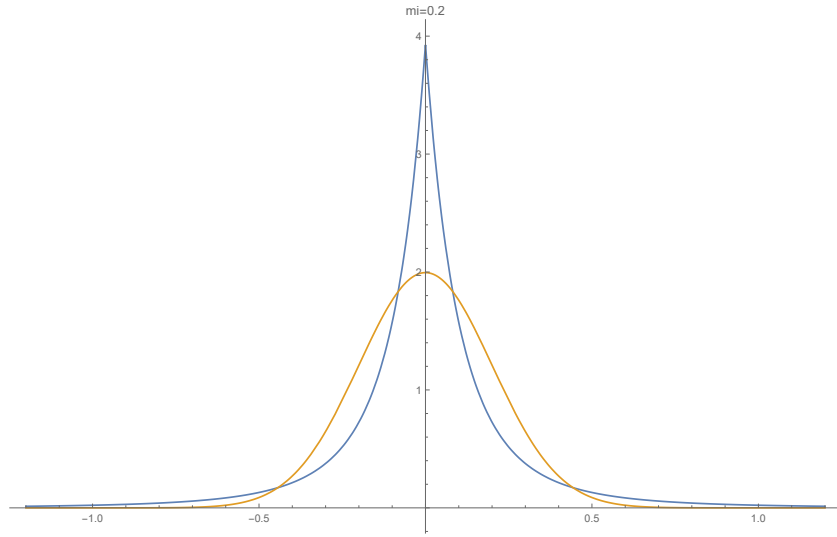
$$\frac{H}{\epsilon} = \sum_{j=-K_{max}}^{K_{max}} j^2 |\alpha_j|^2 + \frac{g}{2L\epsilon} \sum_{\substack{j_1, j_2, j_3, j_4 \\ j_1 + j_2 = j_3 + j_4}} C_{j_1, j_2, j_3, j_4} \alpha_{j_1}^* \alpha_{j_2}^* \alpha_{j_3} \alpha_{j_4}$$

gdzie

$$C_{j_1, j_2, j_3, j_4} = \int_0^1 \int_0^1 dx dy e^{2\pi i(j_3 - j_1)x} V(Lx, Ly) e^{2\pi i(j_4 - j_2)y}$$

Potencjały zostały znormalizowane w taki sposób, że wszystkie całkowały się do tej samej stałej g . W przypadku oddziaływań gaussowskich ich szerokość opisywał parametr $\mu = \frac{\sigma}{L}$, a w przypadku oddziaływań dipol - dipol parametr $\mu_D = \frac{l_{\perp}}{L}$. Aby

porównywane oddziaływania (dipol-dipol i gaussowskie) miały podobny zasięg ustalono związek między parametrem μ i μ_D w taki sposób, że wycałkowane potencjały na tak samo szerokim, symetrycznym przedziale dają 90% wartości całki po całej przestrzeni. Prowadzi to do związku $\mu_D = \frac{1.6}{\sqrt{2\pi}}\mu$ motywowanego pracą [2].



Rysunek 1: Porównanie potencjału gaussowskiego i odpowiadającego mu potencjału dipol-dipol dla $\mu=0.2$

4 Parametr obciążenia

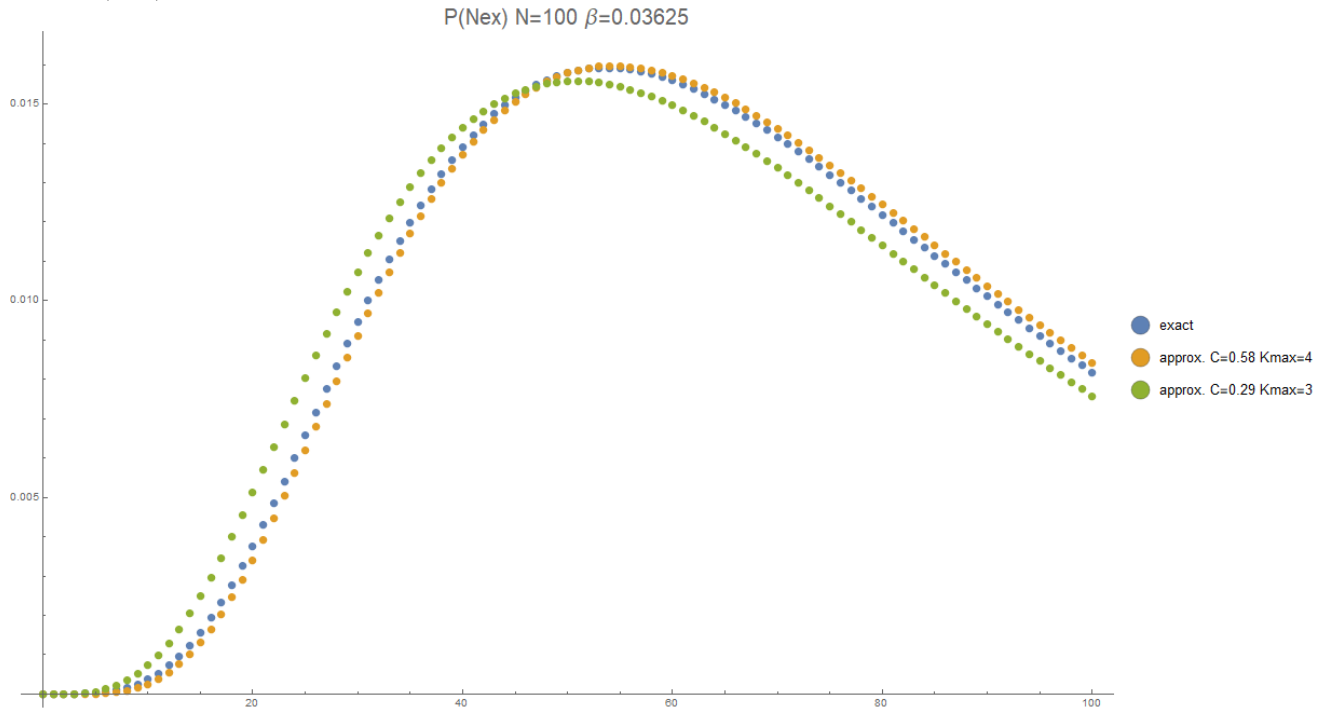
Związek między temperaturą ($\propto \frac{1}{\beta}$) a parametrem obciążenia K_{max} opisuje równanie

$$\beta K_{max}^2 = C, \quad (9)$$

Aby porównywać rozkłady prawdopodobieństwa – ciągły 4 i dyskretny 7 – rozkład 4 wycalkowano na $N + 1$ przedziałach o tej samej długości od 0 do N , i -ty przedział przyjmował postać $[\frac{i}{N+1}N, \frac{i+1}{N+1}N]$.

Stała C została wyznaczona korzystając z kryterium (10) w [1].

Dla $C = 0.58$ rozkłady prawdopodobieństwa – dokładny i klasyczny – najlepiej do siebie pasują, co widać na poniższym wykresie $P(N_{ex})$ dla gazu idealnego.



5 Wyniki symulacji Monte Carlo zespołu kanonicznego

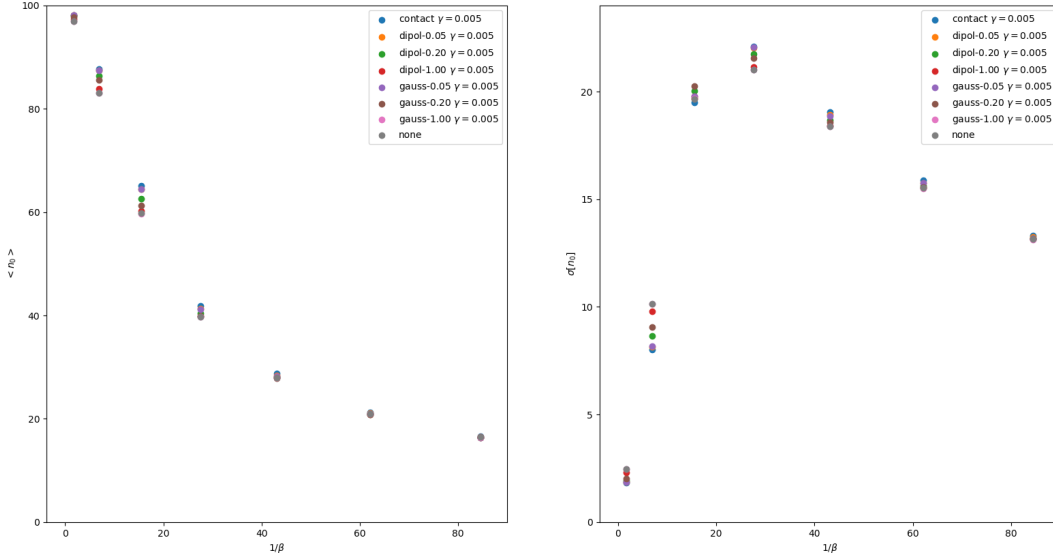
Symulacje wykonano dla temperatur odpowiadającym $K_{max} = 1, 2, \dots, 7$ i oddziaływań o sile $\gamma = \frac{g}{2L\epsilon}$:

1. brak oddziaływania – „none”,
2. kontaktowe – „contact” – $V(x, x') = g\delta(x - x')$,
3. gaussowskie – „gauss- μ ” – $V(x, x') = \frac{g}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-x'}{\sigma})^2}$,
4. dipol-dipol – „dipol- μ_D ” – $V(x, x') = \frac{1}{4l_{\perp}}(-2|\frac{x-x'}{l_{\perp}}| + e^{\frac{1}{2}|\frac{x-x'}{l_{\perp}}|^2}\sqrt{2\pi}(1 + |\frac{x-x'}{l_{\perp}}|^2)\text{Erfc}(|\frac{x-x'}{\sqrt{2}l_{\perp}}|))$,

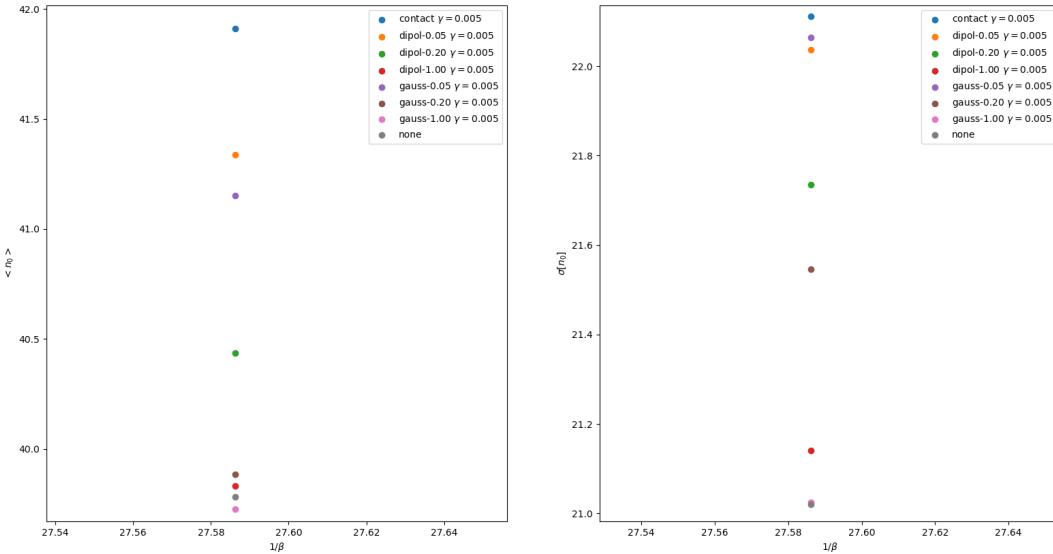
dla $\mu, \mu_D \in \{0.05, 0.20, 1.00\}$.

Stosunek energii oddziaływania do energii całkowitej przyjmował wartości między 10% dla wyższych temperatur a 90% dla niższych.

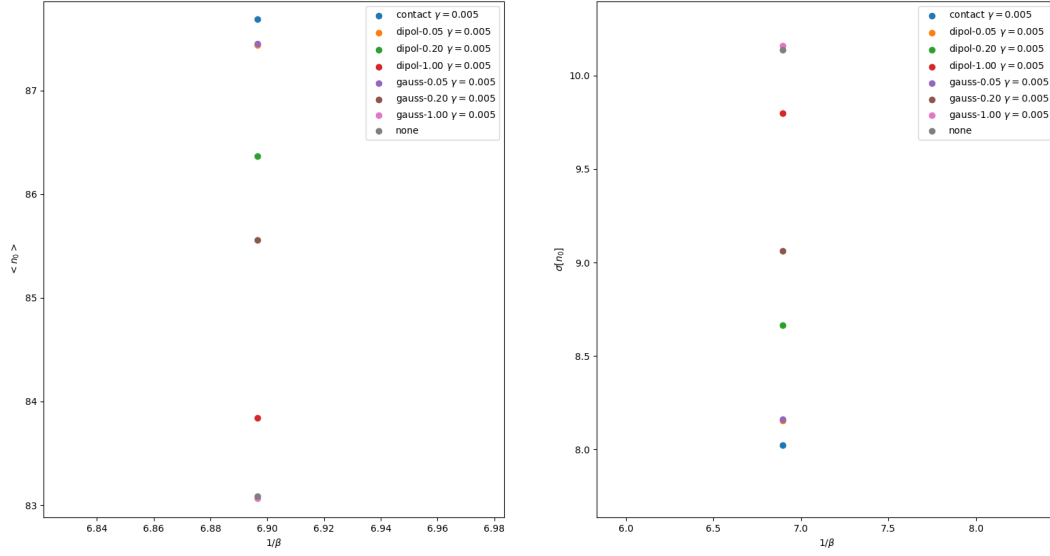
Dla $\beta = 0.03625$, $K_{max} = 4$ fluktuacje stanu podstawowego $\sigma[n_0]$ osiągają maksimum. Widać, że w takiej lub większej temperaturze fluktuacje są uporządkowane rosnąco: brak oddziaływania, oddziaływania szerokie, oddziaływania wąskie z oddziaływaniem kontaktowym osiągającym największe fluktuacje. Porządek ten odwraca się dla $K_{max} \in \{1, 2\}$.



Zbliżenie na wyniki dla $K_{max} = 4$:



Zbliżenie na wyniki dla $K_{max} = 2$:



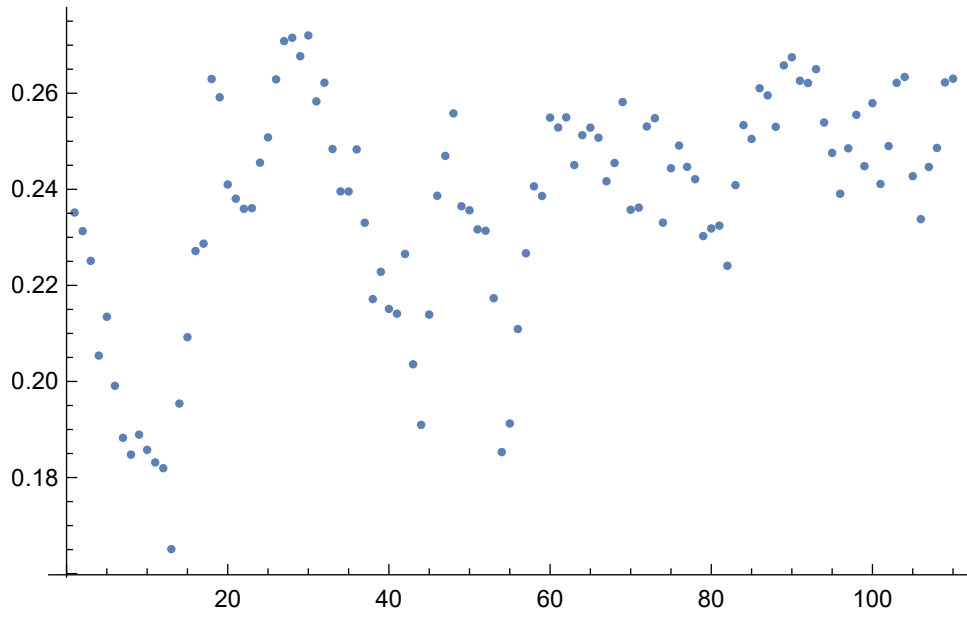
6 Równania różniczkowe opisujące ewolucję gazu - oddziaływania kontaktowe

Wstawiając pole klasyczne do równania Heisenberga otrzymamy układ równań różniczkowych na α_k :

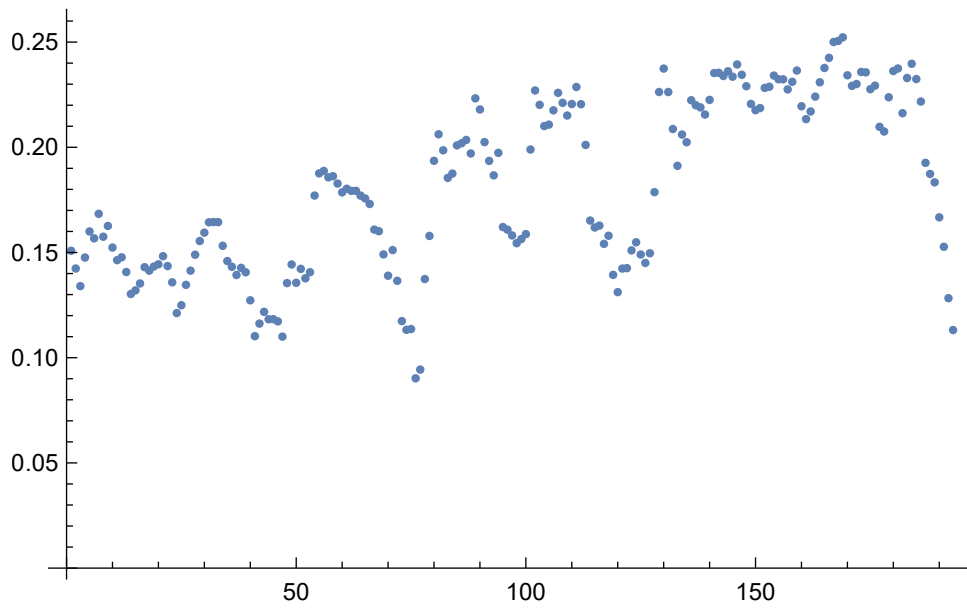
$$i \frac{d\alpha_k}{d\tau} = k^2 \alpha_k + \frac{g}{L\epsilon} \sum_{\substack{j_1, j_2, j_3 \\ j_2 + j_3 - j_1 = k}} \alpha_{j_1}^* \alpha_{j_2} \alpha_{j_3}$$

gdzie $\tau = \frac{t}{\hbar/\epsilon}$ jest bezwymiarowym czasem. Powyższe równania zachowują energię daną wzorem 8, liczbę cząstek i pęd, który jest proporcjonalny do $\sum_{j=-K_{max}}^{K_{max}} j |\alpha_j|^2$.

Po początkowych testach sprawdzających poprawność zapisu równań w Mathematicie (energia, pęd i liczba cząstek była zachowana) napisałem nową wersję, pozwalającą na śledzenie ewolucji dla dłuższych czasów. Program działał w następujący sposób: należało podać warunki początkowe, wartość γ i długość czasu, dla którego program miał rozwiązywać równanie w ramach jednego kroku. Po każdym kroku program generował plik tekstowy z średnimi wartościami obsadzeń i dyspersji uzyskanymi przez całkowanie numeryczne zależności obsadzenia danego poziomu od czasu. Ponadto program generował rysunek zależności $n_0(t)$, obliczał o ile procent zmieniła się energia, pęd i liczba cząstek względem wartości początkowej. Termalizację można było obserwować na wykresie, na który naniesiono wartości średnie obliczone w kolejnych krokach.



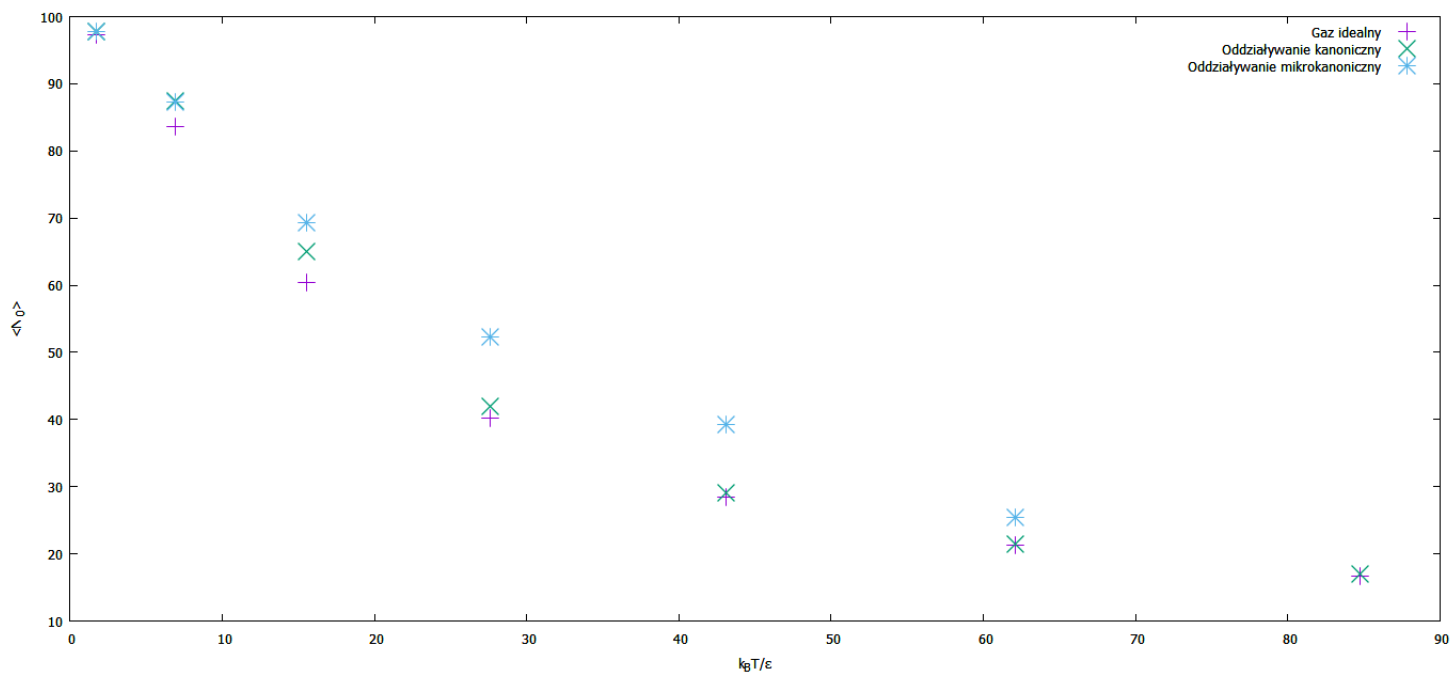
Rysunek 2: Średnie obsadzenia stanu podstawowego wyliczane w kolejnych krokach, 13 modów, $\beta=0.0161$, krok czasowy $t=5000$, $\gamma = 0.005$, 100 atomów



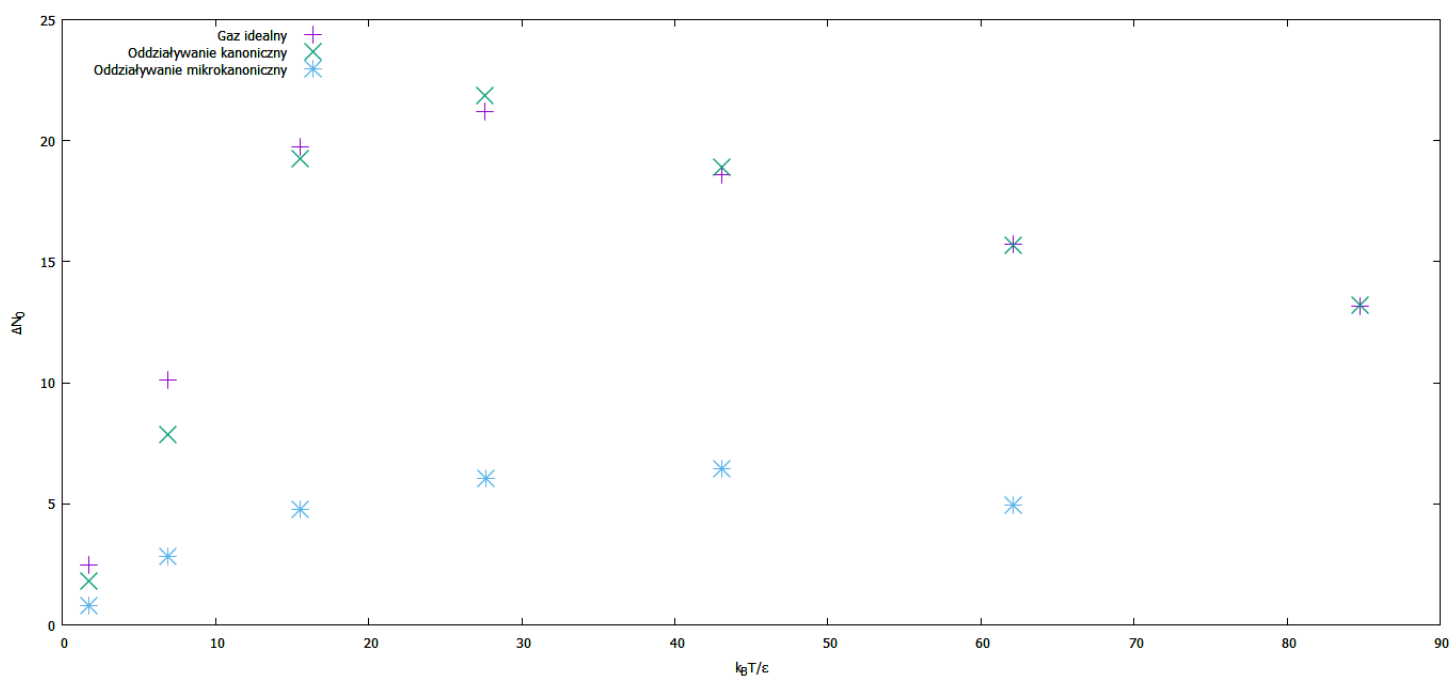
Rysunek 3: Problem z termalizacją, średnie obsadzenia stanu podstawowego wyliczane w kolejnych krokach, 15 modów, $\beta=0.0118$, krok czasowy $t=5000$, $\gamma = 0.005$, 100 atomów

7 Kanoniczny vs mikrokanoniczny

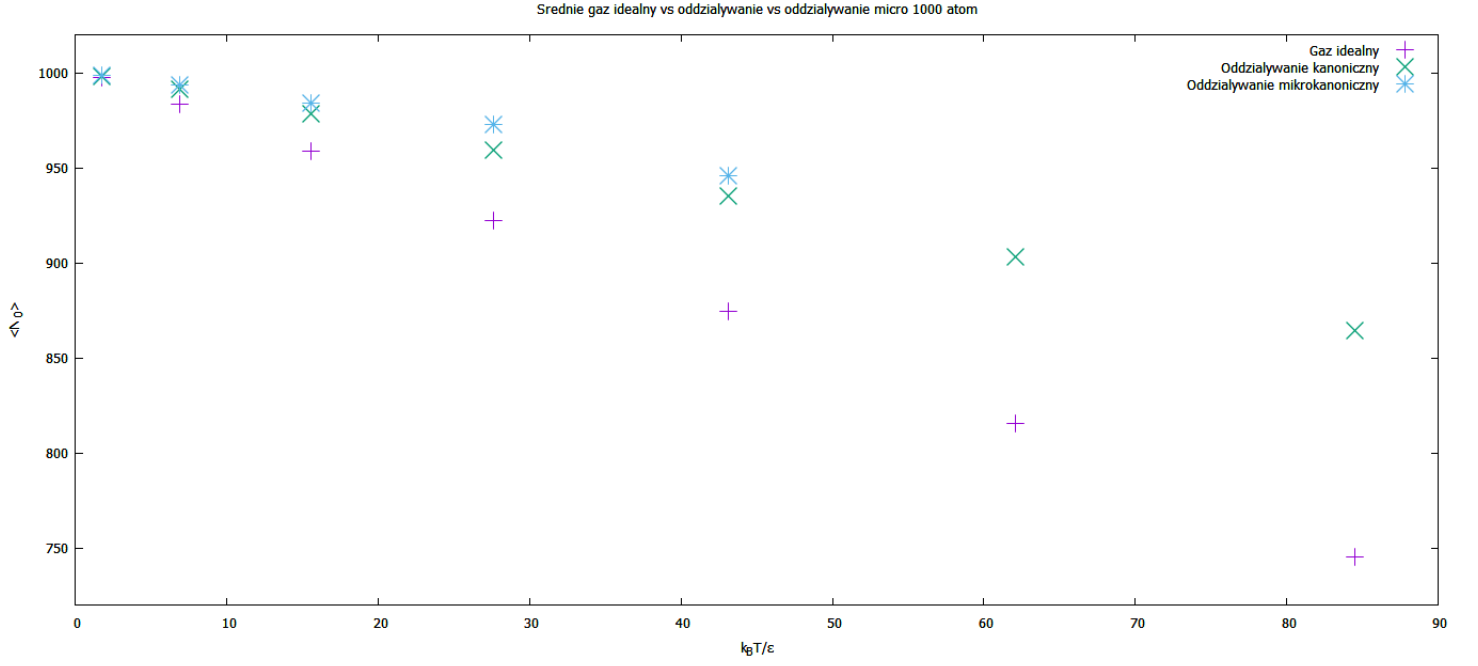
Średnie obsadzenie stanu podstawowego i fluktuacje uzyskane w zespole kanonicznym za pomocą algorytmu Metropolisa porównywano z wynikami z rozwiązywania równań różniczkowych. W celu wybrania warunków początkowych do symulacji, posortowano zbiór współczynników α generujących rozkład prawdopodobieństwa pod kątem odległości od średniej energii i średniego pędu. Poniższe wyniki uzyskano korzystając z metody "ExplicitRungeKutta" w Mathematicie (jest to metoda z adaptacyjnym krokiem) z ustawieniami domyślnymi. Energia nie zmieniała się w czasie symulacji o więcej niż 0,2%, jeszcze lepiej zachowywana była liczba cząstek, pęd przez cały czas był bliski zeru. Wyniki przedstawiono na poniższych wykresach :



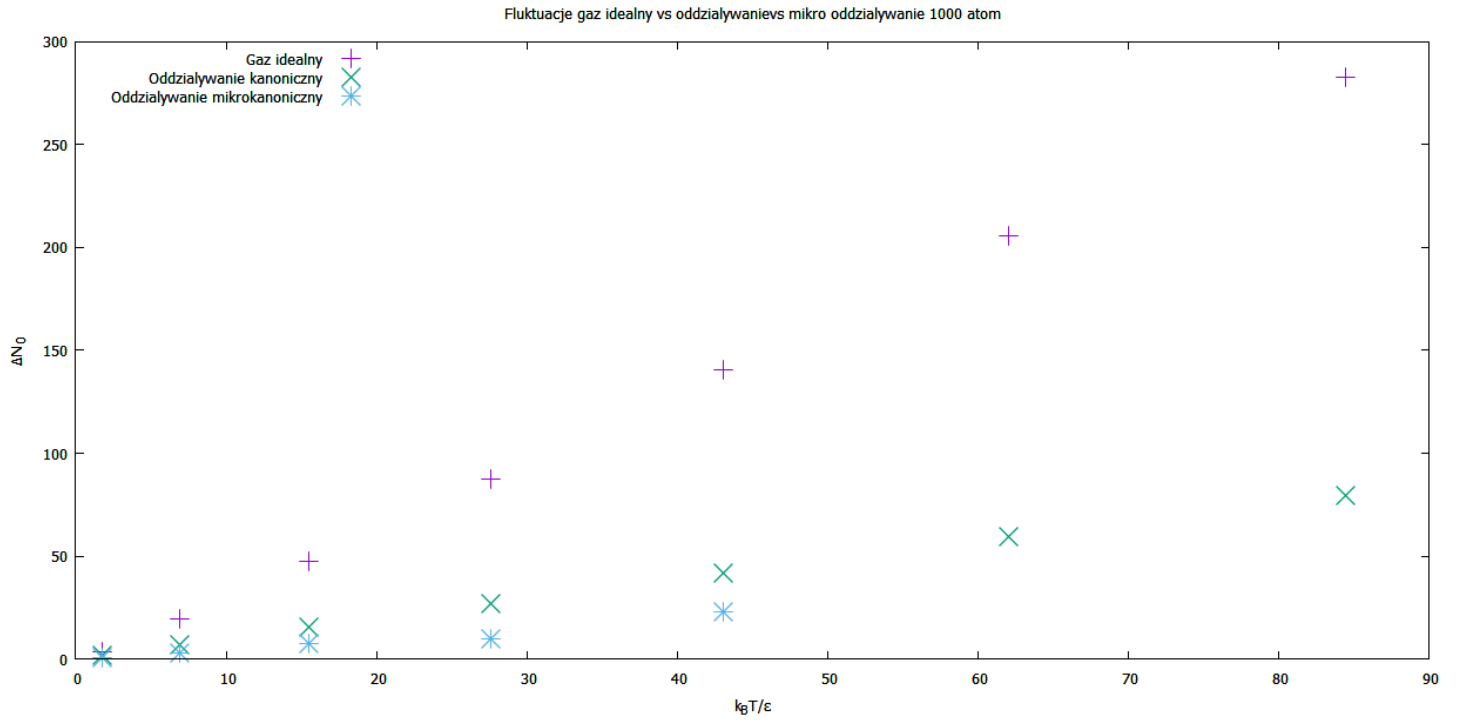
Rysunek 4: Porównanie dwóch zespołów: średnie obsadzenie stanu podstawowego, 100 atomów, $\gamma=0.005$, stosunek energii potencjalnej do całkowitej od 0.14 do 0.97



Rysunek 5: Porównanie dwóch zespołów: fluktuacje obsadzenia stanu podstawowego, 100 atomów, $\gamma=0.005$, stosunek energii potencjalnej do całkowitej od 0.14 do 0.97



Rysunek 6: Porównanie dwóch zespołów: średnie obsadzenie stanu podstawowego, 1000 atomów, $\gamma=0.01$



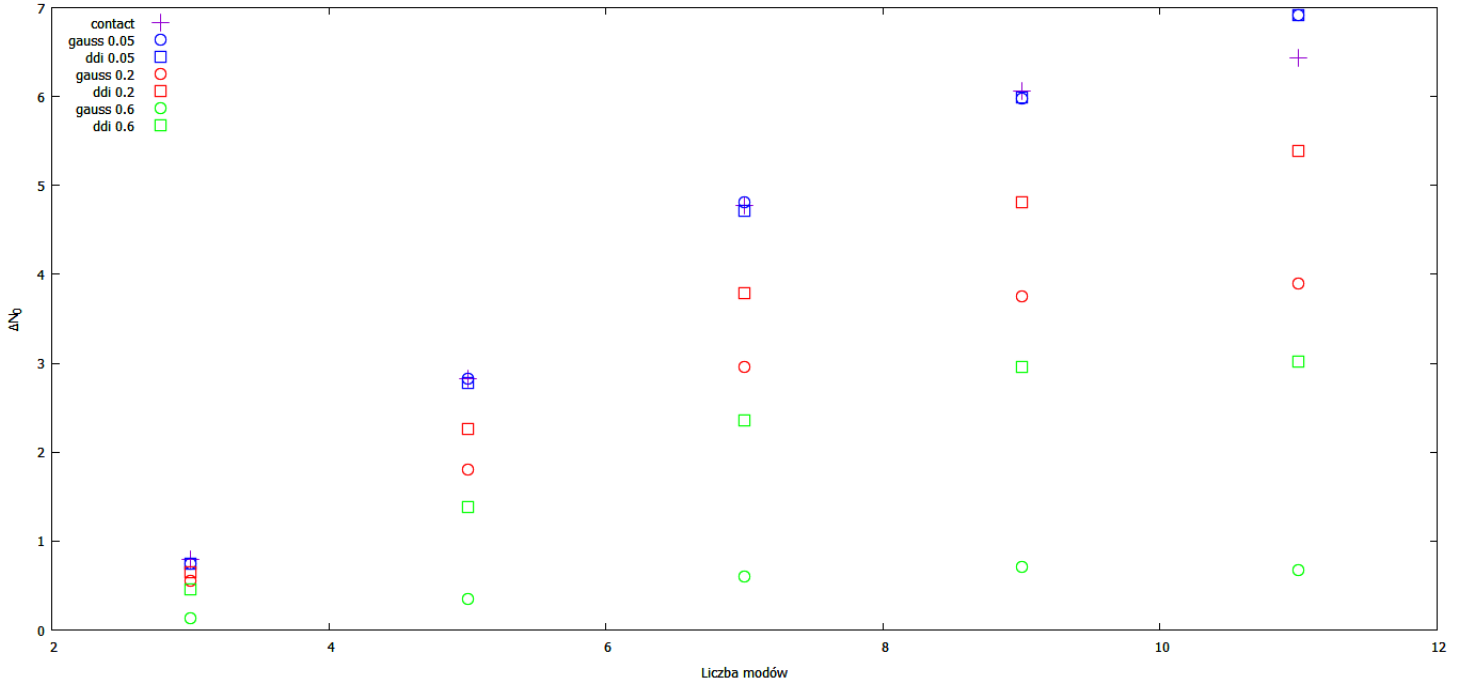
Rysunek 7: Porównanie dwóch zespołów: fluktuacje obsadzenia stanu podstawowego, 1000 atomów, $\gamma=0.01$

8 Równania różniczkowe opisujące ewolucję gazu - oddziaływania dalekoza- sięgowe

Dla oddziaływań dalekozasięgowych równania różniczkowe przyjmują postać:

$$i \frac{d\alpha_k}{d\tau} = k^2 \alpha_k + \frac{g}{L\epsilon} \sum_{j_1, j_2, j_3} C_{j_1, k, j_2, j_3} \alpha_{j_1}^* \alpha_{j_2} \alpha_{j_3}$$

Aby porównać trzy oddziaływania, rozwiązano równania różniczkowe dla każdego z nich, dla tych samych warunków początkowych. Warunki początkowe brano z zespołu kanonicznego dla oddziaływania kontaktowego. Dlatego też, wykresy przedstawione poniżej nie obrazują zależności fluktuacji od temperatury dla wszystkich oddziaływań. Aby to zrobić, należałoby dla każdego oddziaływania brać warunki początkowe z zespołu kanonicznego dla tego oddziaływania. Poniższe wyniki pokazują raczej, jak zmiana oddziaływania (zmiana równań) wpływa na stan równowagi systemu z ustalonymi warunkami początkowymi.



Rysunek 8: Fluktuacje dla trzech oddziaływań

Literatura

- [1] Witkowska, Emilia Gajda, Mariusz Rzażewski, Kazimierz. (2009). Bose statistics and classical fields. Physical Review A. 79. 10.1103/PhysRevA.79.033631.
- [2] Deuretzbacher, Frank C. Cremon, Jonas M. Reimann, Stephanie. (2010). Ground-state properties of few dipolar bosons in a quasi-one-dimensional harmonic trap. Phys. Rev. A. 81. 063616. 10.1103/PhysRevA.81.063616.