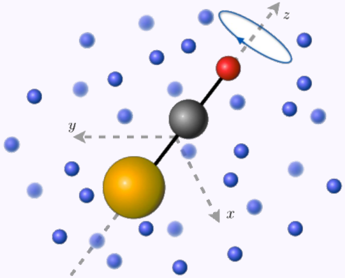
Angulons

ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΠΟΛΛΩΝ ΣΩΜΑΤΩΝ

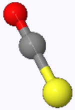
ΘΩΜΟΠΟΥΛΟΣ ΣΠΥΡΟΣ

Εθνικο Μετσοβιο Πολυτεχνειο

25/04/2022



ΜΟΡΙΟ ΣΕ ΥΠΕΡΡΕΥΣΤΟ ^4He



Περιστροφική Κινητική Ενέργεια

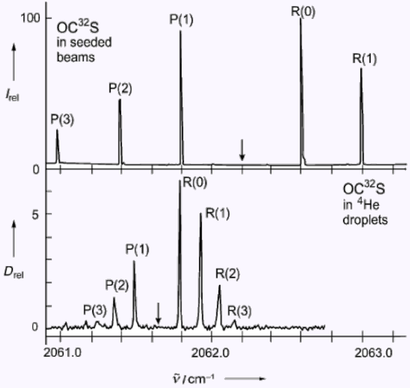
$$H = B\hat{\mathbf{J}}^2$$

όπου

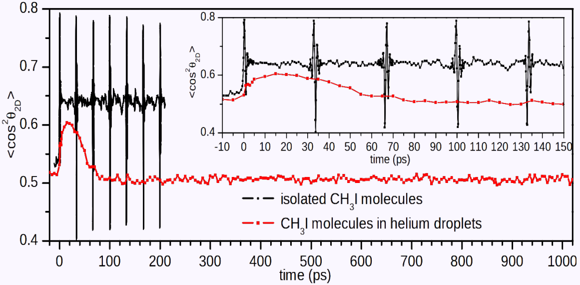
$$B = \frac{1}{2I}$$

Φάσμα: $E = \hbar^2 B(j+1)j$

- **Ερμηνεία:** $B \to B^*$
  - Περιστροφή με *μικρότερη* σταθερά B^*
  - ΄ΑΡΑ με νέα "ενεργό" ροπή αδράνειας **Ι**



ΜΟΡΙΟ ΣΕ ΥΠΕΡΡΕΥΣΤΟ ^4He



$< cos^2\theta >$: βαθμός ευθυγράμμισης μορίου με την γραμμική πόλωση του παλμού laser

- Ελεύθερο μόριο : Άμεση ευθυγράμμιση και επαναφορά ανά τακτά χρονικά διαστήματα (full revival) - αντίστοιχο των ταλαντώσεων Rabi
- Μόριο σε ^4He: Εμφάνιση διαφορετική δυναμικής και νέας χρονικής κλίμακας χωρίς ευθυγράμμιση στον παλμό $\Rightarrow$ Πιθανώς Many Body

ΤΟ ΓΕΝΙΚΟΤΕΡΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ

Ποιά είναι η συμπεριφορά της στροφορμής σε κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων;

ΓΙΑΤΙ ΜΟΡΙΟ ΣΕ ΥΠΕΡΡΕΥΣΤΟ ^4He;

Θεωρητική Διερεύνηση

- Απλό Σύστημα
- Πολλά Πειραματικά Δεδομένα
- Ενδείξεις για την επίδραση του χαρακτήρα των "Πολλών Σωμάτων"

ΓΙΑΤΙ ΜΟΡΙΟ ΣΕ ΥΠΕΡΡΕΥΣΤΟ ^4He;

Θεωρητική Διερεύνηση

- Απλό Σύστημα
- Πολλά Πειραματικά Δεδομένα
- Ενδείξεις για την επίδραση του χαρακτήρα των "Πολλών Σωμάτων"

Σωματίδια υπερρευστού ^4He έχουν χρησιμοποιηθεί από το 90' στην μοριακή φασματοσκοπία, διότι

- $T \sim 0.4K \Longrightarrow$ Όχι συγκρούσεις
- Όχι μεταφορική $\Longrightarrow$ Όχι Doppler Shift

} *Καθαρό Φάσμα*

- Μελέτη μορίων που αντιδρούν εύκολα σε ελεύθερη μορφή

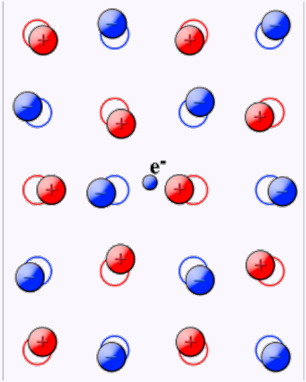
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Ποιά είναι η συμπεριφορά της στροφορμής σε κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων;

ΤΙ ΕΙΝΑΙ ΤΑ ΟΙΟΝΕΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ (QUASIPARTICLES)?

ΠΟΛΑΡΟΝΙΟ

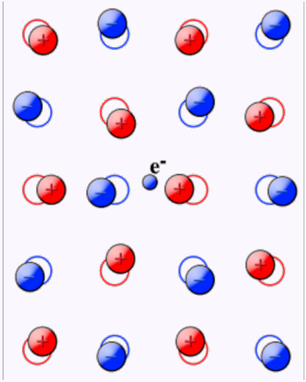
- Ηλεκτρόνιο εντός κρυστάλλου ⇒
- Μετακίνηση & Πόλωση των ιόντων ⇒
- Επαγόμενο Δυναμικό ⇒
- Αύξηση της ενεργού μάζας m^*



Απεικόνιση Πολαρονίου. Ηλεκτρονιακή 'Ατέλεια' σε κρύσταλλο

ΠΟΛΑΡΟΝΙΟ

- Ηλεκτρόνιο εντός κρυστάλλου $\Rightarrow$
- Μετακίνηση & Πόλωση των ιόντων $\Rightarrow$
- Επαγόμενο Δυναμικό $\Rightarrow$
- Αύξηση της ενεργού μάζας m^*

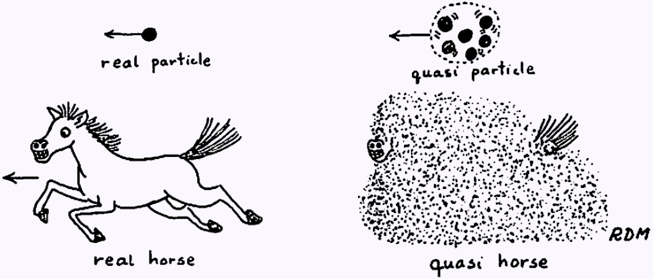


Απεικόνιση Πολαρονίου. Ηλεκτρονιακή 'Ατέλεια' σε κρύσταλλο

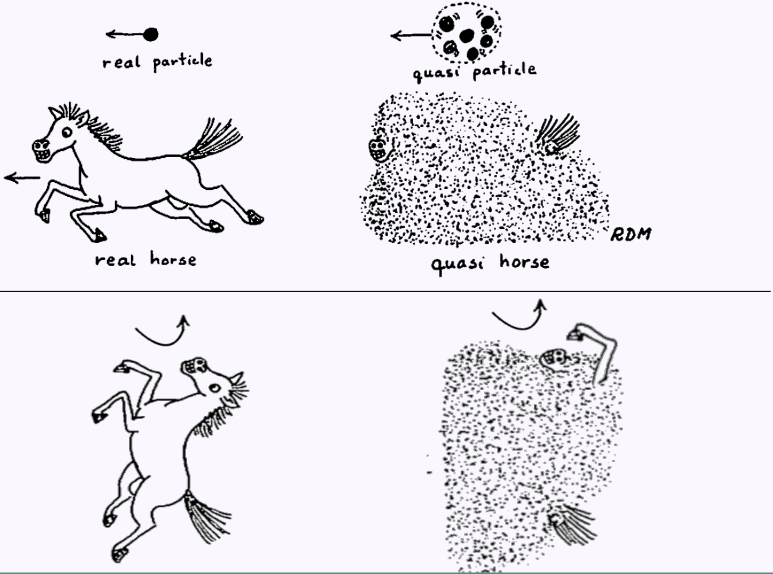
Πολαρόνιο $\longrightarrow$ e^- $+$ Φωνόνια

Quasiparticle $\longrightarrow$ Πραγματικό Σωματίδιο $+$ Many Body Bath

ΔΙΑΙΣΘΗΣΗ?



ΔΙΑΙΣΘΗΣΗ?



ΑΝΑΚΕΦΑΛΑΙΩΣΗ

Ποιά είναι η συμπεριφορά της στροφορμής σε κβαντικά συστήματα πολλών σωματιδίων;

- Έναρξη από απλό μοντέλο $\longrightarrow$ Impurity Problem: 1 Μόριο σε Μποζονικό Περιβάλλον (Bosonic Bath)

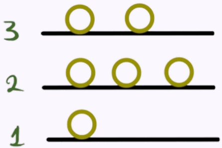
- Πρόβλημα σε τρία μέρη
  - Συμπεριφορά Μορίου
  - Συμπρειφορά Bosonic Bath
  - Αλληλεπίδραση των δύο πρώτων

Χρειαζόμαστε εργαλεία για την αντιμετώπιση του προβλήματος των πολλών ταυτόσημων σωμάτων

2η ΚΒΑΝΤΩΣΗ

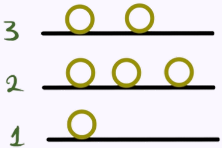
ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ

Ταυτόσημα σωματίδια σε διαφορετικές καταστάσεις

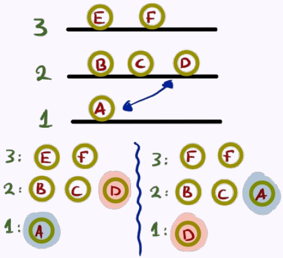


ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ

Ταυτόσημα σωματίδια σε διαφορετικές καταστάσεις

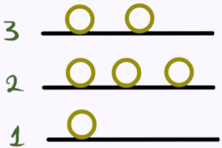


Ποιό σωματίδιο είναι σε ποιά κατάσταση;
1η Κβάντωση

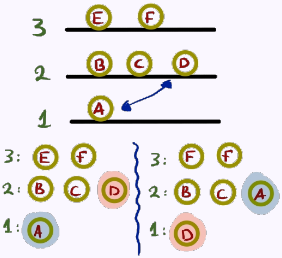


ΒΑΣΙΚΗ ΙΔΕΑ

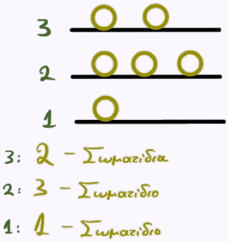
Ταυτόσημα σωματίδια σε διαφορετικές καταστάσεις



Ποιό σωματίδιο είναι σε ποιά κατάσταση;
1η Κβάντωση



Πόσα σωματίδια είναι σε κάθε κατάσταση;
2η Κβάντωση



ΑΞΙΩΜΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ

- Βάση στον χώρο 1-σωματιδίου V_1: $\{|u_i\rangle \in V_1\}, i = 1, N$
- Έστω N ταυτόσημα σωματίδια. Μία γενική κατάσταση είναι

$$|\psi\rangle = |u1\rangle_1 \dots |u_N\rangle_N \in V, V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$$

ΑΞΙΩΜΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ

- Βάση στον χώρο 1-σωματιδίου V_1: $\{|u_i\rangle \in V_1\}, i = 1, N$
- Έστω N ταυτόσημα σωματίδια. Μία γενική κατάσταση είναι

$$|\psi\rangle = |u1\rangle_1 \ldots |u_N\rangle_N \in V, V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$$

Αξίωμα

Το ket ενός συστήματος ταυτόσημων σωματιδίων που μπορεί να περιγράψει φυσικές καταστάσεις είναι:

- Πλήρως Συμμετρικό, $V_+ \subset V \longrightarrow$ Μποζόνια
- Πλήρως Αντισυμμετρικό, $V_- \subset V \longrightarrow$ Φερμιόνια

- ***Μποζόνια:*** Γενικότερη συμμετρική κατάσταση

$$\hat{S}_+|\psi\rangle := \frac{1}{N!}\left(\sum_a \hat{P}_a\right)|u1\rangle_1 \ldots |u_N\rangle_N$$

π.χ. για 2 σωματίδια

$$\hat{S}_+|u_1\rangle_1|u_2\rangle_2 =$$
$$= \frac{1}{2}(|u_1\rangle_1|u_2\rangle_2 + |u_1\rangle_2|u_2\rangle_1)$$

ΠΡΟΣ ΤΗΝ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΑΡΙΘΜΩΝ ΚΑΤΑΛΗΨΗΣ

- Βάση στην χώρο των N-ταυτόσημων, $V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$:
  $\{|u_i\rangle_1 \otimes |u_j\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |u_m\rangle_N \in V, i, j, ..., m = 1, ..., N\}$
- Οι μποζονικές καταστάσεις ζουν στον $V_+ \longrightarrow$ Θέλουμε βάση στον V_+ και όχι στον V
- Βάση στον V_+

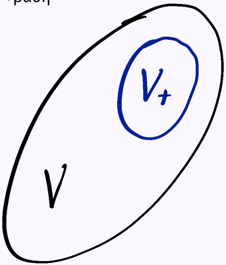
$$
\begin{aligned}
\hat{S}_+|\psi\rangle =& \hat{S}_+ \left(\sum_{i,j,..,m} c_{i,j,\cdots,m} |u_i\rangle_1 |u_j\rangle_2 \ldots |u_m\rangle_N \right) \Rightarrow \\
=& \sum_{i,j,..,m} c_{i,j,\cdots,m} \underbrace{\left(\hat{S}_+ |u_i\rangle_1 |u_j\rangle_2 \ldots |u_m\rangle_N \right)}_{\in V_+ \rightsquigarrow \text{βαση}}
\end{aligned}
$$

- Βάση στην χώρο των N-ταυτόσημων, $V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$:
  $\{|u_i\rangle_1 \otimes |u_j\rangle_2 \otimes \cdots \otimes |u_m\rangle_N \in V, i, j, ..., m = 1, ..., N\}$
- Οι μποζονικές καταστάσεις ζουν στον $V_+ \longrightarrow$ Θέλουμε βάση στον V_+ και όχι στον V
- Βάση στον V_+

$$\begin{aligned}\hat{S}_+|\psi\rangle =&\hat{S}_+\left(\sum_{i,j,..,m} c_{i,j,\cdots,m}|u_i\rangle_1|u_j\rangle_2\ldots|u_m\rangle_N\right) \Rightarrow\\ =&\sum_{i,j,..,m} c_{i,j,\cdots,m}\underbrace{\left(\hat{S}_+|u_i\rangle_1|u_j\rangle_2\ldots|u_m\rangle_N\right)}_{\in V_+ \rightsquigarrow \text{βαση}}\end{aligned}$$

ΠΡΟΒΛΗΜΑ: Αν η διάσταση του V είναι:
$dim(V) = k$, τότε προκύπτει ότι

$$dim(V_+) = dim\left(\hat{S}_+|u_i\rangle_1|u_j\rangle_2\ldots|u_m\rangle_N\right) = k$$



ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΑΡΙΘΜΩΝ ΚΑΤΑΛΗΨΗΣ

- Έστω ότι έχουμε συνολικά N σωματίδια και n_i σωματίδια στην κατάσταση $|u_i\rangle$. Μία βάση στον χώρο $V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$ είναι

$$\underbrace{|u_1\rangle_1 \ldots |u_1\rangle_{n_1}}_{n_1 \text{ σωματίδια}} \underbrace{|u_2\rangle_{n_1+1} \ldots |u_2\rangle_{n_1+n_2}}_{n_2 \text{σωματίδια}} \cdots \quad \underbrace{|u_k\rangle_i}_{n_k \text{σωματίδια}} \quad \cdots$$

- Δεν είναι συμμετρική
- Μένει αναλλοίωτη σε μεταθέσεις $\hat{p}_a$
- Αν συμμετρικοποιήσουμε δρώντας με τον $\hat{S}_+$ παίρνουμε μία βάση του V_+

ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΑΡΙΘΜΩΝ ΚΑΤΑΛΗΨΗΣ

- Έστω ότι έχουμε συνολικά N σωματίδια και n_i σωματίδια στην κατάσταση $|u_i\rangle$. Μία βάση στον χώρο $V = V_1 \otimes \cdots \otimes V_N$ είναι

$$\underbrace{|u_1\rangle_1 \dots |u_1\rangle_{n_1}}_{n_1 \text{ σωματίδια}} \underbrace{|u_2\rangle_{n_1+1} \dots |u_2\rangle_{n_1+n_2}}_{n_2 \text{σωματίδια}} \dots \quad \underbrace{|u_k\rangle_i}_{n_k \text{σωματίδια}} \quad \dots$$

- Δεν είναι συμμετρική
- Μένει αναλλοίωτη σε μεταθέσεις $\hat{p}_a$
- Αν συμμετρικοποιήσουμε δρώντας με τον $\hat{S}_+$ παίρνουμε μία βάση του V_+

Ορισμός

$$|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots\rangle \sim \hat{S}_+ |u_1\rangle_1 \cdots |u_1\rangle_{n_1} |u_2\rangle_{n_1+1} \cdots |u_2\rangle_{n_2} \cdots |u_k\rangle_i \cdots$$

- **Π.Χ.:** Η κατάσταση $|1, 0, 5\rangle$ σημαίνει πώς στην κατάσταση $|u_1\rangle$ έχουμε $n_1 = 1$ σωματίδιο, η κατάσταση $|u_1\rangle$ είναι κενή και στην $|u_3\rangle$ έχουμε $n_3 = 5$

ΜΠΟΖΟΝΙΚΟΙ ΤΕΛΕΣΤΕΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ-ΚΑΤΑΣΤΡΟΦΗΣ

- Τώρα που έχουμε την κατάσταση $|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots\rangle$ με καθορισμένο αριθμό σωματιδίων $N = \sum_k n_k$ μπορούμε να τον μεταβάλλουμε

Ορισμός

Ορίζουμε τον Μποζονικό Τελεστή Δημιουργίας $(\hat{\alpha}_{u_k})^+$ που δρα σε μία μονοσωματιδική κατάσταση $|u_k\rangle$ ως:

$$(\hat{\alpha}_{u_k})^+|n_1 n_2, \cdots, n_k, \cdots\rangle := \sqrt{n_k + 1}|n_1 n_2, \cdots, n_k + 1, \cdots\rangle$$

- Ο συζυγής του Τελεστή Δημιουργίας καλείται Τελεστής Καταστροφής, καθώς ισχύει

$$\alpha\hat{u}_k|n_1 n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = \sqrt{n_k}|n_1 n_i, \cdots, n_k - 1, \cdots\rangle$$

- Ισχύουν οι μεταθετικές $\left[\hat{\alpha}_i^+, \hat{\alpha}_j^+\right] = 0$, $\left[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j\right] = 0$ & $\left[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j^+\right] = \delta_{ij}$
- Ο αριθμός σωματιδίων στην $|u_k\rangle$ είναι η ιδιοτιμή του $\hat{n}_{u_i} = \hat{\alpha}_{u_i}^+ \hat{\alpha}_{u_i}$

ΤΕΛΕΣΤΗΣ 1-ΣΩΜΑΤΟΣ (1-BODY OPERATOR)

- Έστω χώρος N σωματιδίων $V = V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_k \otimes \cdots \otimes V_N$
- Θέλουμε τελεστή $\hat{f}_k$ που δρα μόνο στο σωματίδιο k, δηλαδή στον χώρο V_k

$$\underbrace{\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{f}_k \otimes \ldots \mathbf{1}_N}_{\hat{f}_k}$$

- Δράση τελεστή $\rightarrow$ ίδια σε ανταλλαγή 2 σωματιδίων

Ορισμός

Ο Τελεστής 1-Σώματος ορίζεται ως

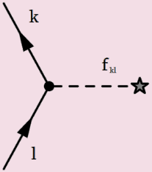
$$\hat{F} = \sum_{k=1}^{N} \hat{f}_k$$

όπου ο καθε ένας από τους $\hat{f}_k$ δρα σε στον υπόχωρο V_k ενός σωματιδίου

ΤΕΛΕΣΤΗΣ 1-ΣΩΜΑΤΟΣ (1-BODY OPERATOR)

- Σε όρους 2ης Κβάντωσης

$$\hat{F} = \sum_{kl} f_{kl} \hat{\alpha}_k^{+} \hat{\alpha}_l$$



- Ορμή : $\hat{p} = \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{k} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}}^{+} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}}$,
- Κινητική Ενέργεια : $T = \sum_{\boldsymbol{k}} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \alpha_{\boldsymbol{k}}^{+} \alpha_{\boldsymbol{k}}$
- Δυναμική Ενέργεια $U = U_0 \sum_{\boldsymbol{kq}} U(\boldsymbol{q}) \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}^{+} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}}$

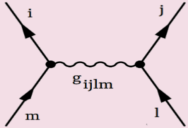
ΤΕΛΕΣΤΗΣ 2-ΣΩΜΑΤΩΝ (2-BODY OPERATORS)

- Κατ' αντιστοιχία ορίζουμε τελεστές $\hat{g}_{kk'}$ που δρουν στον υπόχωρο δύο σωματιδίων π.χ. $V_k \otimes V_{k'}$ και αφήνουν όλους τους υπόλοιπους αναλλοίωτους

$$\underbrace{\mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{g}_{kk'} \otimes \ldots \mathbf{1}_N}_{\hat{g}_{kk'}}$$

- Ο συμμετρικός 2-body operator στην γλώσσα της 2ης Κβάντωσης

$$\hat{G} = \frac{1}{2} \sum_{ijlm} g_{ijlm} \hat{\alpha}_i^+ \hat{\alpha}_j^+ \hat{\alpha}_m \hat{\alpha}_l$$



- Περιγραφή αλληλεπιδράσεων σε συστήματα πολλών σωμάτων σε όρους αλληλεπιδράσεων μεμονωμένων σωματιδίων

HAMILTONIAN ΤΩΝ ANGULONS

1ο ΜΕΡΟΣ: ΜΟΡΙΟ

- Αποτελείται από τρια μέρη
  1. Μόριο
  2. Bosonic Bath
  3. Αλληλεπίδρασή τους

$$H = H_{molecule} + B_{bath} + B_{interaction}$$

- Για γραμμικά μόρια

$$H_{molecule} = B\hat{\boldsymbol{J}}^2, \text{ όπου } B = 1/2I$$

- Οι ιδιοτιμές είναι

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)$$

2ο ΜΕΡΟΣ: BOSONIC BATH

- Δύο μέρη: Κινητική Ενέργεια Μποζονίων και Αλληλεπίδραση Μποζονίου-Μποζονίου

$$H_{boson} = \sum_{\boldsymbol{k}} \epsilon_{\boldsymbol{k}} \hat{\alpha}^{+}_{\boldsymbol{k}} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}} V_{bb}(\boldsymbol{q}) \hat{\alpha}^{+}_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}} \hat{\alpha}^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}'} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}}$$

- *Φυσικές Υποθέσεις:* (1.) Ασθενώς αλληλεπιδρώντα μποζόνια
  (2.) Αραιό Διάλυμα
  (3.) Περισσότερα Μποζόνια στην βασική
  + Διακυμάνσεις
- Τελική Μορφή

$$H_{boson} = \sum_{k\lambda\mu} \omega_k \hat{b}^{+}_{k\lambda\mu} \hat{b}_{k\lambda\mu}$$

όπου $\omega_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}} + 2V_{bb}n)}$

- Η αλληλεπίδραση Μορίου-Μποζονίων δίνεται από την Hamiltonian

$$H_{interaction} = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} V_{inter.}(\boldsymbol{q}, \hat{\phi}, \hat{\theta}, \hat{\gamma}) \cdot \rho(\boldsymbol{q}) \hat{\alpha}^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} \hat{\alpha}_{\boldsymbol{k}}$$

- Μετασχηματισμοί και Αναπτύγματα σε Σφαιρικές Αρμονικές

⋮

⋮

$$H_{interaction} \simeq \sum_{k\lambda\mu} U_{\lambda}(k) \left[Y^{*}_{\lambda\mu}(\hat{\theta}, \hat{\phi}) \hat{b}^{+}_{k\lambda\mu} + Y_{\lambda\mu}(\hat{\theta}, \phi) \hat{b}_{k\lambda\mu} \right]$$

ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΣΥΝΟΛΙΚΑ

- Υπερψυχρα Μόρια συζευγμένα με ασθενώς αλληλεπιδρών BEC

ANGULON

$$H = B\hat{\mathbf{J}}^2 + \sum_{k\lambda\mu} \omega_k \hat{b}^+_{k\lambda\mu} \hat{b}_{k\lambda\mu} + \sum_{k\lambda\mu} U_\lambda(k) \left[Y^*_{\lambda\mu}(\hat{\theta}, \hat{\phi}) \hat{b}^+_{k\lambda\mu} + Y_{\lambda\mu}(\hat{\theta}, \hat{\phi}) \hat{b}_{k\lambda\mu} \right]$$

- Υποθέσεις
  - Γραμμικό Μόριο (π.χ. OCS)
  - Πλειοφηφία Μποζονίων σε βασική κατάσταση + Διαταρραχές
    $\hat{n} = \underbrace{\hat{\alpha}^+_0 \hat{\alpha}_0}_{n_0} + \sum_{k\neq 0} \hat{\alpha}^+_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$
  - Αλληλεπίδραση Μποζονίων ανεξάρτητη του $\mathbf{q}$ (αραιό ρευστό)
    $V_{bb}(\mathbf{q}) = const.$
  - Αμελητέα η μεταφορική κίνηση της ατέλειας

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-1

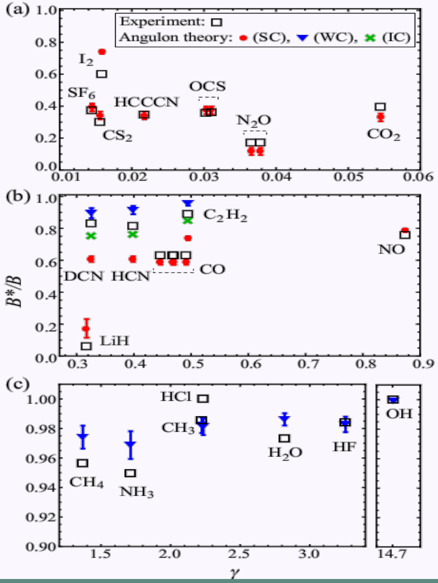
- γ : Σταθρεά Σύζευξης
- $B = 1/2I$: Σταθερά Περιστροφής
- B^* : Νέα Σταθρεά Περιστροφής

$$\gamma = B/\Delta, \Delta \sim |V|$$

- Για ασθενή σύζευξη $\gamma > 1$ έχουμε πολύ μικρές αποκλίσεις $\sim 2\%$

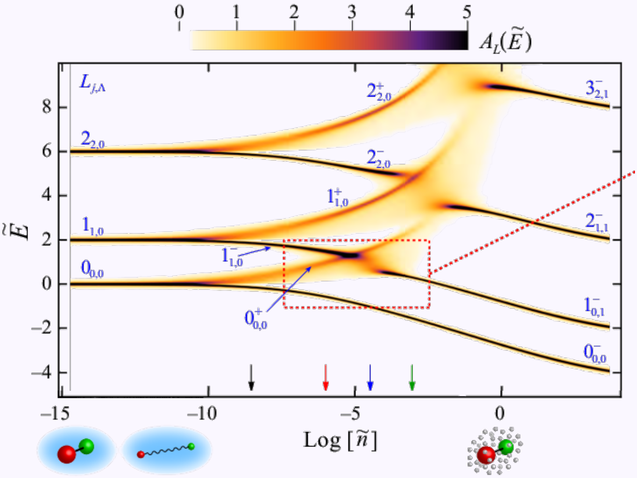
Για χαμηλοενεργειακές μεταβάσεις

$j = 0 \rightarrow j = 1$



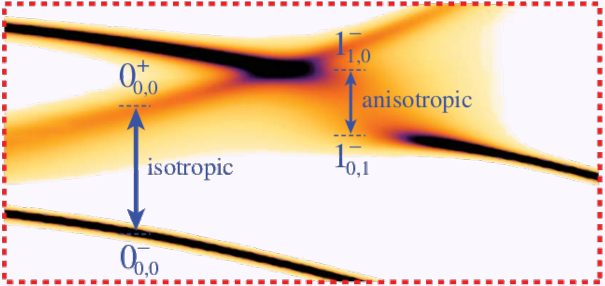
ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-2

- $\tilde{E} = E/B$,
  $\tilde{n} = n(mB)^{1,5}$
- Κατάσταση Angulon: $L_{j,\Lambda}$, L συνολική, j μορίου, Λ μποζονίων
- Σκούρες Γραμμές $\rightarrow$ Ευσταθείς κατστάσεις angulon



- *Θεωρητικοί Υπολογισμοί:* Variational Method
- Επιλογή Ansatz $|\psi\rangle$: Πλειοψηφία μποζονίων στην βασική κατάσταση
- Ελαχιστοποίηση της ενέργειας $E = \langle\psi|H|\psi\rangle$

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-2



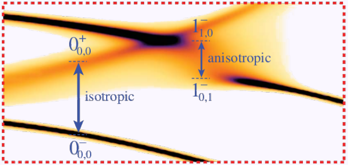
- Πρώτος Διαχωρισμός λόγω ισοτροπικών αλληλεπιδράσεων μορίου-bath, μεταξύ των καταστάσεων

$$|j = L,\ \text{no excitations}\rangle - |j = L,\ 1\ \text{excitation}\ \rangle$$

- Δεύτερος Διαχωρισμός λόγω ανισοτροπικών αλληλεπιδράσεων μορίου-bath, μεταξύ των καταστάσεων

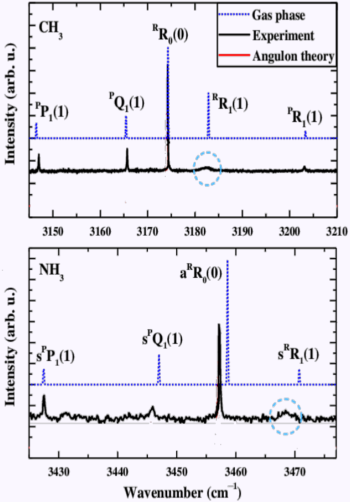
$$|j = L, \text{no excitations}\rangle - |j = L - 1, 1\ \text{excitation}\ \lambda = 1\rangle$$

ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-2

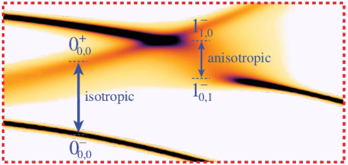


Αρχική εικόνα απλής μετατόπισης των φασματικών γραμμών ΟΧΙ ακριβής

- Αλληλεπίδραση με many-body bath $\rightarrow$ μεταφορά τροχιακής στροφορμής από το μόριο στο bath.

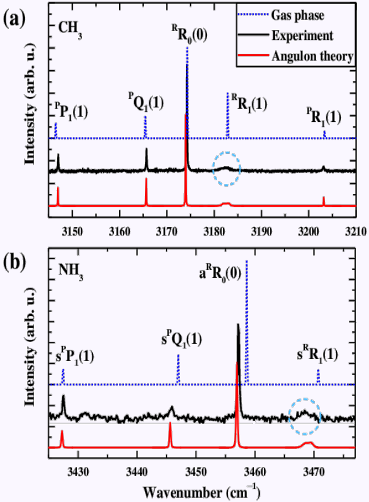


ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-2

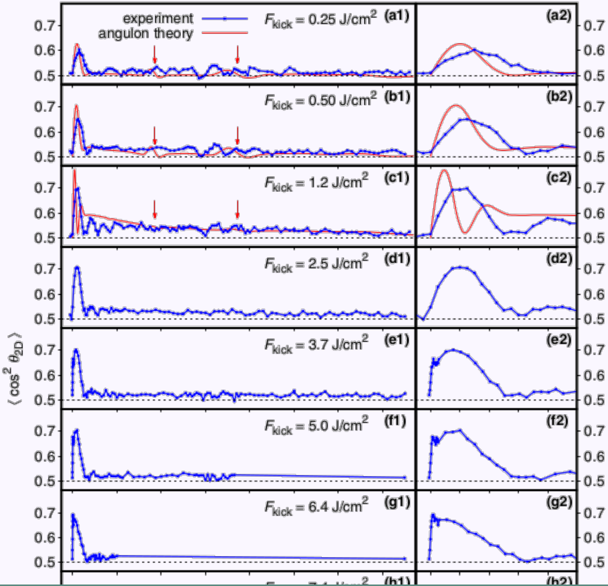


Αρχική εικόνα απλής μετατόπισης των φασματικών γραμμών ΟΧΙ ακριβής

- Αλληλεπίδραση με many-body bath → μεταφορά τροχιακής στροφορμής από το μόριο στο bath.



ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΙΒΕΒΑΙΩΣΗ-3



ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΧΗ :)

Βιβλιογραφια I

Igor N. Cherepanov and Mikhail Lemeshko.
Fingerprints of angulon instabilities in the spectra of matrix-isolated molecules.
Physical Review Materials, 1(3):035602, August 2017.
arXiv:1705.09220 [cond-mat, physics:physics].

Karsten Flensberg Henrik Bruus.
Many-body quantum theory in condensed matter physics.
2002.

Mikhail Lemeshko.
Quasiparticle approach to molecules interacting with quantum solvents.
Physical Review Letters, 118(9):095301, February 2017.
arXiv:1610.01604 [cond-mat, physics:physics].

Xiang Li.
Rotation of coupled cold molecules in the presence of a many-body environment, 2020.

Mikhail Lemeshko and Richard Schmidt.
Molecular impurities interacting with a many-particle environment: from helium droplets to ultracold gases, April 2017.
arXiv:1703.06753.

Gerald D. Mahan.
Many Body Particle Physics.
Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.

Βιβλιογραφια II

Richard D. Mattuck.
A Guide to Feynman Diagrams in the Many Body Problems.
McGraw Hill Inc., 1974.

A. Mauracher, O. Echt, A.M. Ellis, S. Yang, D.K. Bohme, J. Postler, A. Kaiser, S. Denifl, and P. Scheier.
Cold physics and chemistry: Collisions, ionization and reactions inside helium nanodroplets close to zero K.
Physics Reports, 751:1–90, August 2018.

Dominik Pentlehner, Jens H. Nielsen, Alkwin Slenczka, Klaus Mølmer, and Henrik Stapelfeldt.
Impulsive Laser Induced Alignment of Molecules Dissolved in Helium Nanodroplets.
Physical Review Letters, 110(9):093002, March 2013.
arXiv:1212.2862.

Richard Schmidt and Mikhail Lemeshko.
Rotation of Quantum Impurities in the Presence of a Many-Body Environment.
Physical Review Letters, 114(20):203001, May 2015.

Benjamin Shepperson, Anders A. Søndergaard, Lars Christiansen, Jan Kaczmarczyk, Robert E. Zillich, Mikhail Lemeshko, and Henrik Stapelfeldt.
Laser-Induced Rotation of Iodine Molecules in Helium Nanodroplets: Revivals and Breaking Free.
Physical Review Letters, 118(20):203203, May 2017.

J. Peter Toennies and Andrey F. Vilesov.
Superfluid Helium Droplets: A Uniquely Cold Nanomatrix for Molecules and Molecular Complexes.
Angewandte Chemie International Edition, 43(20):2622–2648, May 2004.

Βιβλιογραφια III

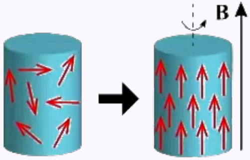
Zhongda Zeng.
Variational theory of angulons and their rotational spectroscopy, 2022.

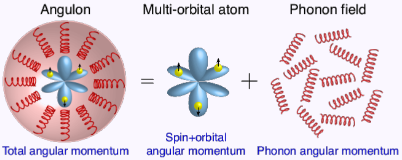
Γρηγοριος Χ. Ψαλτακης.
Κβαντικα Συστηματα Πολλων Σωματιδιων.
Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2008.

BACKUP

ΑΛΛΑ ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ

- Φαινόμενο Einstein-de Haas





- Περιστρεφόμενο Μόριο σε $^{4}He \rightarrow$ Σωματίδιο σε σφαίρα με μαγνητικό μονόπολο στο κέντρο

Αναγκαιοτητα ONR

- Ποιές είναι οι επαναλαμβανόμενες-περιττές καταστάσεις στον V_+;

Βάση V	$\hat{S}_+$	Βάση V_+
$\|u_i\rangle_1\|u_j\rangle_2\cdots\|u_m\rangle_N$		$\hat{S}_+\left(\|u_i\rangle_1\|u_j\rangle_2\cdots\|u_m\rangle_N\right)$
$\hat{p}_a\left(\|u_i\rangle_1\|u_j\rangle_2\cdots\|u_m\rangle_N\right)$		$\hat{S}_+\left(\hat{p}_a\|u_i\rangle_1\|u_j\rangle_2\cdots\|u_m\rangle_N\right)$

- Όμως οι δύο βάσεις ταυτίζονται διότι

$$\hat{S}_+\left(\hat{p}_a|u_i\rangle_2|u_j\rangle_2\cdots|u_m\rangle_N = \frac{1}{N!}\sum_\beta \hat{p}_\beta\hat{p}_a\left(|u_i\rangle_2|u_j\rangle_2\cdots|u_m\rangle_N\right) =\right.$$

$$= \hat{S}_+\left(|u_i\rangle_2|u_j\rangle_2\cdots|u_m\rangle_N\right)$$

- Άρα θέλουμε μία ποσότητα που αναλοίωτη για κάθε μετάθεση στον V

Fock Space

- Στην Occupation Number Representation έχουμε π.χ. $|n_1 n_2 \cdots n_k \cdots\rangle$. Αυτό σημαίνει πως έχει συγκεκριμένο αριθμό σωματιδίων $N = \sum_k n_k$.
- Αυτή η κατάσταση με συγκεκριμένο αριθμό σωματιδίων ονομάζεται κατάσταση Fock
- Μία τέτοια κατάσταση ανήκει στον χώρο $\mathbb{F}_N$ που περιέχει όλες τις καταστάσεις με N αριθμό σωματιδίων

Ορισμός

Το ευθύ άθροισμα όλων των χώρων με καθορισμένο αριθμό σωματιδίων καλείται χώρος Fock

$$\mathbb{F} = \bigoplus_{i=0} \mathbb{F}_i$$

- Χρησιμότητα Χώρου Fock
  - Συστήματα με μεταβαλλόμενο αριθμό σωματιδίων (QFT, QSM)
  - Για συστήματα που έχουν ίδιο αριθμό σωματιδίων στην αρχική και την τελική κατάσταση αλλά στο ενδιάμεσο ο αριθμός μεταβάλλεται

Φερμιονικοι Τελεστες Δημιουργιας/Καταστροφης

- Τώρα που έχουμε την κατάσταση $|n_j, n_k, \cdots\rangle$ με καθορισμένο αριθμό σωματιδίων $N = \sum_k n_k$. Επειδή είναι φερμιόνια έχουμε ότι $n_k = 0$ ή 1.

Ορισμός

Ορίζουμε τον Φερμιονικό Τελεστή Δημιουργίας $(\hat{c}_{u_k})^+$ που δρα σε μία μονοσωματιδική κατάσταση $|u_k\rangle$ ως:

$$(\hat{c}_{u_i})^+ |n_j, n_k, \cdots\rangle := |n_i, n_j, n_k, \cdots\rangle, n_p = 0, 1$$

- Ο συζυγής του Τελεστή Δημιουργίας καλείται Τελεστής Καταστροφής, καθώς ισχύει

$$\hat{c}_{u_i} |n_i, n_j, n_k, \cdots\rangle := |n_j, n_k, \cdots\rangle$$

- Ισχύουν: $\hat{c}_{u_i} |n_i, n_j, n_k, \cdots\rangle = 0$ & $\hat{c}_{u_i} |n_j, n_k, \cdots\rangle = 0$
- Ισχύουν οι ΑΝΤΙμεταθετικές $\left\{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\right\} = 0$, $\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0$ $\left\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^+\right\} = \delta_{ij}$
- Ξεκιώντας από το τιποτα φτάνουμε στην γενική κατάσταση $\mathbb{F}_N$

$$|n_1, n_2, \cdots, n_k\rangle = (\hat{c}_{u_1})^+ (\hat{c}_{u_2})^+ \ldots (\hat{c}_{u_k})^+ \ldots |0\rangle$$

ΤΕΛΕΣΤΕΣ

- Η δράση του $\hat{A}$ δίνει $|\Psi'\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle$
- Όμως έχουμε ότι $|\Psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle$ & $|\Psi'\rangle = \sum_i c_i'|u_i\rangle$
- Οι συντελεστές της νέας κατάστασης είναι

$$c_i' = \langle u_i|\Psi'\rangle = \langle u_i|\hat{A}|\Psi\rangle = \langle u_i|\hat{A}\underbrace{\left(\sum_j |u_k\rangle\langle u_k|\right)}_{1}|\Psi\rangle \Rightarrow \tag{1}$$

$$= \sum_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle = \sum_j A_{ij}\langle u_j|\Psi\rangle \tag{2}$$

- Άρα εξ' ορισμού έχουμε

$$|\Psi'\rangle = \sum_i c_i'|u_i\rangle \xRightarrow{(4)}$$

$$= \sum_i (\sum_j A_{ij}\langle u_j|\Psi\rangle)|u_i\rangle \Rightarrow$$

$$= \sum_{ij} \left(|u_i\rangle A_{ij}\langle u_j|\right)|\Psi\rangle$$

- Άρα κάθε τελεστής μπορεί να γραφεί ως

$$\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij}|u_i\rangle\langle u_j|, \text{ όπου } A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$$

Variational Ansatz

- Απλούστερο Ansatz για την κατάσταση πολλών σωμάτων

$$|\psi\rangle = Z_{LM}^{1/2}|0\rangle|LM\rangle + \sum_{k\lambda\mu,jm} \beta_{k\lambda j} C_{jm,\lambda\mu}^{LM} \hat{b}_{k\lambda\mu}^{+}|0\rangle|jm\rangle$$

  $\beta_{k\lambda\mu}$ και Z_{LM} παράμετροι
- $|0\rangle$: Αναφέρεται στη μη-διεγερμένη κατάσταση του Many-Body bath
- L,M στροφορμή του μορίου και προβολή της στον άξονα z
- j,m διαφορετική στροφορμή του μορίου. Η μεταβολή της οφείλεται στην μεταφορά στροφορμής από τις διεγερμένες κατστάσεις ορμής k και στροφορμής λ, μ του Many-Body bath στο μόριο
- $C_{jm,\lambda\mu}^{LM}$: Συντελεστές Glebsch-Gordan
- $Z_{LM} = 1 - \sum_{k\lambda\mu} |\beta_{k\lambda\mu}|^2$: Quasiparticle weight, βαθμός ομοιότητας με το ελέυθερο μόριο.
  - $Z_{LM} \to 0$: Προσεγγίζει το ελεύθερο μόριο
  - $Z_{LM} \to 1$: Τόσο ισχυρές διαταραχές που καταρρέει η έννοια του angulon