

*Uniwersytet Warszawski
Wydział Fizyki
Instytut Fizyki Teoretycznej*

*Tomasz Sowiński
nr albumu: 195985*

***Pełny klasyczny i kwantowy opis ruchu
w wirującej pułapce harmoniczej***

*Praca magisterska na kierunku fizyka
w zakresie fizyki teoretycznej*

*Praca wykonana pod kierunkiem
prof. dr. hab. Iwo Białynickiego-Biruli
z Instytutu Fizyki Teoretycznej UW*

Warszawa, czerwiec 2005

Oświadczenie kierującego pracą

Oświadczam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i stwierdzam, że spełnia ona warunki do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

.....
data

.....
podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przez mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Oświadczam ponadto, że niniejsza wersja pracy jest identyczna z załączoną wersją elektroniczną.

.....
data

.....
podpis autora pracy

Streszczenie

W pracy przedstawiona jest pełna analiza klasycznej i kwantowej dynamiki w trójwymiarowej, anizotropowej pułapce harmoniczej obracającej się wokół osi dowolnie zorientowanej względem pułapki. Sklasyfikowane są obszary dynamicznej stabilności i niestabilności układu oraz przewidziane jest zjawisko rezonansu grawitacyjnego. Zdefiniowana i przeanalizowana jest cała klasa układów - tzw. układów liniowych i podany jest jednoznaczny przepis na konstrukcję pełnego zbioru funkcji falowych dowolnego układu liniowego na podstawie znajomości wyłącznie klasycznych trajektorii. Zaproponowany jest model jakościowo opisujący oddziaływania w układzie i zbadany jest wpływ tych oddziaływań na dynamikę układu.

Słowa kluczowe

pułapka harmoniczna, obrót, rezonans grawitacyjny,
układ liniowy, funkcja falowa, Riccati

Dziedzina pracy
(kody wg programu Socrates-Erasmus)

13.2 Fizyka

Podziękowania

Bardzo dziękuję mojemu promotorowi panu profesorowi Iwo Białynickiemu-Biruli za niezliczone długie dyskusje, które wpłynęły na ostateczny kształt tej pracy, a przede wszystkim ukształtowały moje rozumienie Przyrody.

Bardzo dziękuję mojej przyszłej żonie Agnieszce, która dzień w dzień mobilizowała mnie do pracy, dodawała mi niezbędnych sił w trudnych momentach, a przede wszystkim za to, że dzięki Niej zaczęły się spełniać moje marzenia.

Praca została napisana w ramach projektu badawczego „*Zjawiska elektromagnetyczne w układach obracających się i przyspieszanych*” finansowanego ze środków Komitetu Badań Naukowych w latach 2004-2006.

*Moim Rodzicom
za życie, miłość i wykształcenie*

Spis treści

Wstęp	ix
1 Separacja dynamiki oddziałującego układu	1
1 Separacja dynamiki klasycznej	1
2 Separacja dynamiki kwantowej	4
2 Dynamika cząstki w obracającej się pułapce harmoniczej	7
1 Układ obracający się	7
1.1 Równania ruchu	7
1.2 Hamiltonian	8
2 Obracający się potencjał harmoniczny	9
3 Stałe ruchu	10
3.1 Liniowe stałe ruchu	10
3.2 Kwadratowe stałe ruchu	11
4 Rozwiązanie poprzez mody własne	13
4.1 Równanie charakterystyczne	13
5 Stabilność ruchu	15
5.1 Pierwszy obszar niestabilności	16
5.2 Punkty o podwyższonej symetrii	18
5.3 Drugi obszar niestabilności	20
6 Symulacja numeryczna dynamiki	23
6.1 Obrót zdegenerowany	23
6.2 Obrót niezdegenerowany	23
3 Wpływ pola grawitacyjnego na dynamikę	27
1 Dlaczego grawitacja jest ważna?	27
2 Wirowanie pola grawitacyjnego w układzie obracającym się	27
3 Równania ruchu i warunki rezonansu	29
4 Poszukiwania rezonansu	31
5 Symulacja dynamiki z polem grawitacyjnym	32

4	Klasa układów liniowych	37
1	Hamiltonian układu liniowego	37
1.1	Diagonalizacja formy pędów	37
1.2	Uproszczenie niejednorodności	38
1.3	Antysymetryzacja członu mieszanego	39
2	Zagadnienie własne dla jednorodnego układu liniowego	40
5	Funkcje falowe układów liniowych	43
1	Dynamika paczki gaussowskiej	44
1.1	Równania ewolucji	44
1.2	Ewolucja kształtu paczki	45
2	Gaussowski stan stacjonarny	48
2.1	Warunki stacjonarności	48
2.2	Algebraiczne macierzowe równanie Riccatiego	49
2.3	Wybór modów własnych do konstrukcji \hat{K}_0	50
3	Pozostałe stany stacjonarne	50
3.1	Ruch paczki o stałym kształcie	50
3.2	Wybór modu wzbudzającego	52
3.3	Rozwinięcie w stany stacjonarne	53
6	Jakościowe uwzględnienie oddziaływań	55
1	Nieliniowe równania Schrödingera	55
2	Logarytmiczne równanie Schrödingera	56
2.1	Logarytmiczne równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego	57
3	Logarytmiczne równanie Schrödingera dla wirującej pułapki	58
3.1	Ewolucja paczki gaussowskiej	59
3.2	Rozwiązania stacjonarne	59
A	Wyznaczenie stałych ruchu	65
1	Przypadek zdegenerowany	65
2	Przypadek ogólny	66
B	Programy do symulowania trajektorii	69
1	Dynamika w dwóch wymiarach	69
2	Dynamika w trzech wymiarach	70
3	Dynamika z uwzględnieniem grawitacji	72
C	Twierdzenia matematyczne	75
1	Macierzowe równanie Riccatiego	75
2	Wartości własne pewnej macierzy	77
3	Układ równań (6.20)	77

Wstęp

„Wtedy bowiem sądzimy, żeśmy daną rzecz poznali,
gdyśmy wykryli pierwsze przyczyny i pierwsze zasady
aż do ostatecznych elementów.”

Arystoteles, **Fizyka**

Obrót makroskopowych obiektów kwantowych, takich jak hel w fazie nadciekłej czy atomy tworzące kondensat Bosego-Einsteina, jest źródłem spektakularnych zjawisk, których dogłębne zbadanie stoi przed współczesną fizyką. Doświadczalnie takie badania najczęściej realizuje się umieszczając układ w pułapce magnetoptycznej, którą z bardzo dobrym przybliżeniem można modelować przez obracający się potencjał harmoniczny. Choć powszechnie używa się takiego opisu, to dotychczas pełna analiza dynamiki w takim potencjale nie była dokonana. W pierwszym kroku bowiem zawsze zakłada się [10, 11, 12, 13, 14], że obrót następuje wokół wyróżnionej osi pułapki (skierowanej pionowo). Tym samym zagadnienie zostaje sprowadzone do problemu dwuwymiarowego znanego w mechanice klasycznej od ponad stu lat [4]. Taki dwuwymiarowy problem został dogłębnie przestudiowany dla klasycznego gazu w stanie równowagi [12], zostały znalezione jednoczątkowe funkcje falowe dla takiego modelu [10, 11], przeprowadzono analizę w sformuowaniu hydrodynamicznym mechaniki kwantowej [13] i przeprowadzono pierwsze eksperymenty na kondensujących atomach w takich pułapkach [14].

Przewidziane teoretycznie [15], a następnie zaobserwowane w doświadczeniach [16, 17] tzw. mody nożyczkowe (ang. *scissors modes*) powstające w skutek minimalnego odchylenia osi obrotu od kierunku osi głównej pułapki każą przypuszczać, że dowolność w ustawieniu osi obrotu może prowadzić do nowych, ciekawych efektów. Pojawia się zatem potrzeba pełnego przestudiowania dynamiki w ogólnym, trójwymiarowym przypadku, co jest przedmiotem mojej pracy.

Cel pracy

Moja praca ma mieć w zamierzeniu charakter przeglądowy i dawać pełny opis dynamiki w obracającej się trójwymiarowej pułapce harmonicznej. Wychodząc od najprostszych własności układów harmonicznym, przez pełną analizę ich klasycznej dynamiki w trzech wymiarach (również z uwzględnieniem zewnętrznego pola grawitacyjnego) pokazuję, że dyskutowany układ jest jedynie szczególnym przypadkiem szerszej klasy układów - *układów liniowych*. Następnie podaję jednoznaczny przepis (korzystając wyłącznie ze znajomości klasycznych trajektorii) na

konstrukcję pełnego układu funkcji falowych opisujących dowolny układ liniowy. Ostatnim krokiem jest uwzględnienie w opisie oddziaływań wewnętrznych układu realizowane poprzez dodanie do równania Schrödingera członu nieliniowego.

W rozdziale 1. przedstawiona jest podstawowa własność układów harmoniczych - separowalność ich dynamiki. Okazuje się, że dla układu wielu ciał oddziałujących dowolnymi siłami wzajemnymi i znajdujących się w zewnętrznym potencjale harmonicznym dowolnie zależącym od czasu dynamikę można zawsze podzielić na dynamikę środka masy układu oraz dynamikę ruchu względnego. Separacja ta zachodzi zarówno w opisie klasycznym jak i kwantowym, a dynamika środka masy jest w obu przypadkach zgodna z dynamiką pojedynczej klasycznej cząstki w zadanym potencjale zewnętrznym [18].

Pełny opis dynamiki klasycznej cząstki w obracającym się jednostajnie, trójwymiarowym potencjale harmonicznym przedstawiony jest w rozdziale 2. W odróżnieniu od wszystkich dotychczasowych rozważań problem przedyskutowany jest bez nakładania dodatkowych warunków na kierunek obrotu. Przy założeniu, że obrót następuje wokół osi, która nie jest równoległa do jednej z osi głównych pułapki pojawia się dodatkowy obszar niestabilności - przedział częstości obrotu pułapki, pomiędzy którymi dynamika jest niestabilna [3]. Ta obserwacja może być istotna dla fizyki eksperymentalnej kondensatów Bosego-Einsteina.

Trzeci rozdział mojej pracy wyrasta z obserwacji, że eksperymenty fizyczne przeprowadzane na Ziemi muszą zawsze uwzględniać istnienie siły przyciągania ziemskiego. W wielu przypadkach to oddziaływanie nie ma żadnego znaczenia lub, jak w przypadku drgań obciążonej sprężyny, wpływa jedynie na położenie punktu równowagi. Jednak w przypadku układów obracających się wokół osi nachylonej względem pionu ziemskie pole grawitacyjne w układzie spoczywającym pułapki ma charakter wirujący i jak zostało pokazane w rozdziale 3. przy pewnych warunkach może prowadzić do zjawiska rezonansu [1]. Przedstawiona jest pełna dyskusja tego zjawiska w wirującej, trójwymiarowej pułapce harmoniczej.

Układy liniowe, czyli układy, których kanoniczne równania ruchu są równaniami różniczkowymi liniowymi pierwszego rzędu są przedmiotem dyskusji rozdziału 4. Pokazuję, że dyskusowany dotychczas przypadek wirującej pułapki harmoniczej jest szczególną realizacją układu liniowego. Ma to istotne znaczenie w rozdziale 5., gdzie podaję pełny opis kwantowej dynamiki dowolnego układu liniowego. Okazuje się, że pełny układ funkcji własnych kwantowego układu liniowego można skonstruować znając jedynie rozwiązania klasycznych równań ruchu - tzw. *mody własne*. Ta obserwacja oznacza, że cała wiedza na temat dynamiki kwantowej zawarta jest w klasycznych trajektoriach w przestrzeni fazowej układu.

Rozdział 6. jest próbą uwzględnienia w opisie oddziaływań wewnętrznych w układzie. Najczęściej dokonuje się tego rozważając nieliniowe równanie Grossa-Pitaevskiego [25]. W mojej pracy, rezygnując z ilościowego opisu zjawiska, rozważam tzw. *logarytmiczne równanie Schrödingera* i pokazuję, że nieliniowość (symulująca w pewien sposób oddziaływanie międzyatomowe) prowadzi do zaskakujących wniosków [2]. Okazuje się, że nawet oddziaływanie odpychające w układzie może prowadzić do stabilizacji dynamiki w warunkach, w których dynamika bez oddziaływania jest niestabilna. Dyskusja ta, ze względu na konieczność rozwiązywania równań nieliniowych, przeprowadzona jest w przypadku pułapki obracającej się wokół jednej z jej osi głównych.

Niektóre fragmenty niniejszej pracy zostały opublikowane [1, 2, 3].

Rozdział 1

Separacja dynamiki oddziałującego układu

Zasadniczym celem mojej pracy magisterskiej jest dogłębne zbadanie i przedyskutowanie dynamiki pojedynczej cząstki umieszczonej w obracającej się pułapce harmoniczej. W niniejszym rozdziale chciałbym przedstawić argumenty, że dobre zrozumienie tego problemu ma również znaczenie w opisie układu wielu cząstek, zarówno klasycznych jak i kwantowych, oddziałujących dowolnymi wzajemnymi siłami. Jest tak bowiem dlatego, że jeśli tylko mamy do czynienia z potencjałem harmonicznym (nawet dowolnie zależnym od czasu), to dynamika środka masy całego układu (zarówno klasycznego jak i kwantowego) jest całkowicie niezależna się od dynamiki wewnętrznej układu i jest taka sama jak dynamika pojedynczej klasycznej lub kwantowej cząstki w takim potencjale. Udowodnienie tego faktu, za [18], jest właśnie przedstawione w tym rozdziale.

1 Separacja dynamiki klasycznej

Rozważamy układ N identycznych, klasycznych punktów materialnych o masie m oddziałujących ze sobą siłami dwuciałowymi, które są izotropowe i jednorodne w przestrzeni. Cały układ umieszczony jest w pułapce - zewnętrznym polu harmonicznym, którego parametry mogą zmieniać się w czasie. Hamiltonian takiego układu jest następujący¹:

$$\mathcal{H} = \sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{p}^a \cdot 2}{2m} + \frac{m}{2} \sum_{a=1}^N \mathbf{r}^a \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r}^a + \sum_{a=1}^N \sum_{b>a}^N U(|\mathbf{r}^a - \mathbf{r}^b|), \quad (1.1)$$

gdzie funkcja U jest potencjałem oddziaływania, a macierz \hat{V} opisuje zewnętrzne pole i jest symetryczną, ew. zależną od czasu macierzą. Oczywiście położenia \mathbf{r}^a i pędy \mathbf{p}^a są wzajemnie

¹Indeksy górne (z literami z początku alfabetu) numerują cząstki, a indeksy dolne (z literami ze środka alfabetu) numerują współrzędne przestrzenne wektorów.

sprzężonymi zmiennymi kanonicznymi, tzn. spełnione są następujące nawiasy Poissona:

$$\{r_i^a, p_j^b\} = \delta_{ij}\delta^{ab}, \quad (1.2a)$$

$$\{r_i^a, r_j^b\} = \{p_i^a, p_j^b\} = 0. \quad (1.2b)$$

Aby uprościć nasz opis możemy przejść do układu odniesienia związanego ze środkiem masy całego układu:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \mathbf{r}^a, \quad \mathbf{P} = \sum_{a=1}^N \mathbf{p}^a. \quad (1.3)$$

Wtedy współrzędne poszczególnych atomów w tym układzie wyrażają się następująco:

$$\mathbf{R}^a = \mathbf{r}^a - \mathbf{R}, \quad \mathbf{P}^a = \mathbf{p}^a - \frac{1}{N}\mathbf{P}. \quad (1.4)$$

W tym miejscu należy podkreślić, że taka zamiana zmiennych nie jest transformacją kanoniczną. Nowe współrzędne \mathbf{R}^a i \mathbf{P}^a nie są bowiem niezależne, a związane zależnościami:

$$\sum_{a=1}^N \mathbf{R}^a = 0, \quad \sum_{a=1}^N \mathbf{P}^a = 0. \quad (1.5)$$

Ze względu na te zależności nawiasy Poissona dla nowych zmiennych mają postać:

$$\{R_i, P_j\} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \{r_i^a, p_j^b\} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \delta_{ij}\delta^{ab} = \delta_{ij}, \quad (1.6a)$$

$$\{R_i, R_j\} = \{P_i, P_j\} = 0, \quad (1.6b)$$

$$\{R_i, P_j^a\} = \{R_i, p_j^a\} - \frac{1}{N}\{R_i, P_j\} = \frac{1}{N} \sum_{b=1}^N \{r_i^b, p_j^a\} - \frac{1}{N}\delta_{ij} = 0, \quad (1.6c)$$

$$\{P_i, R_j^a\} = \{P_i, r_j^a\} - \{P_i, R_j\} = \sum_{b=1}^N \{p_i^b, r_j^a\} + \delta_{ij} = 0, \quad (1.6d)$$

$$\{R_i, R_j^a\} = \{P_i, P_j^a\} = 0, \quad (1.6e)$$

$$\begin{aligned} \{R_i^a, P_j^b\} &= \{r_i^a, p_j^b\} - \{R_i, P_j^b\} = \{r_i^a, p_j^b\} = \{r_i^a, p_j^b\} - \frac{1}{N}\{r_i^a, P_j\} = \\ &= \delta_{ij}\delta^{ab} - \frac{1}{N} \sum_{c=1}^N \{r_i^a, p_j^c\} = \delta_{ij}\delta^{ab} - \frac{1}{N}\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (1.6f)$$

$$\{R_i^a, R_j^b\} = \{P_i^a, P_j^b\} = 0. \quad (1.6g)$$

Z zależności (1.6f) widać, że przesunięte zmienne dynamiczne (1.4) nie są dobrymi zmiennymi kanonicznymi, gdyż dla różnych cząstek ($a \neq b$) występuje nieznikający nawias Poissona. Jest to efekt wspomnianej wcześniej zależności nowych zmiennych (1.5).

Inaczej jest natomiast ze zmiennymi opisującymi dynamikę środka masy \mathbf{R} i \mathbf{P} . Z wzorów (1.6a) i (1.6b) wynika bowiem, że mają one własność zmiennych kanonicznych. Dodatkowo

znikające nawiasy Poissona (1.6c), (1.6d) i (1.6e) oznaczają, że są one całkowicie niezależne od pozostałych stopni swobody układu. Ma zatem sens pytanie o hamiltonian i dynamikę opisującą środek masy całego układu.

Hamiltonian (1.1) można przepisać do nowych zmiennych wykorzystując następujące związki:

$$\begin{aligned}
\sum_{a=1}^N \mathbf{r}^a \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r}^a &= \sum_{a=1}^N (\mathbf{R}^a + \mathbf{R}) \cdot \hat{V} \cdot (\mathbf{R}^a + \mathbf{R}) = \\
&= \sum_{a=1}^N \mathbf{R}^a \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}^a + 2\mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \sum_{a=1}^N \mathbf{R}^a + \sum_{a=1}^N \mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R} = \\
&= \sum_{a=1}^N \mathbf{R}^a \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}^a + N\mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}, \tag{1.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{a=1}^N \mathbf{P}^{a\ 2} &= \sum_{a=1}^N \left(\mathbf{P}^a + \frac{\mathbf{P}}{N} \right)^2 = \\
&= \sum_{a=1}^N \mathbf{P}^{a\ 2} + \frac{2\mathbf{P}}{N} \cdot \sum_{a=1}^N \mathbf{P}^a + \sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{P}^2}{N^2} \\
&= \sum_{a=1}^N \mathbf{P}^{a\ 2} + \frac{\mathbf{P}^2}{N}, \tag{1.8}
\end{aligned}$$

$$\sum_{a=1}^N \sum_{b>a}^N U(|\mathbf{r}^a - \mathbf{r}^b|) = \sum_{a=1}^N \sum_{b>a}^N U(|\mathbf{R}^a - \mathbf{R}^b|). \tag{1.9}$$

Hamiltonian separuje się nam formalnie na dwie części, z których jedna jest związana wyłącznie ze zmiennymi opisującymi ruch środka masy, a druga ze zmiennymi (niekanonicznymi) opisującymi dynamikę względem środka masy poszczególnych cząstek:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{CM} + \mathcal{H}_I. \tag{1.10}$$

$$\mathcal{H}_{CM} = \frac{\mathbf{P}^2}{2mN} + \frac{mN}{2} \mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}, \tag{1.11a}$$

$$\mathcal{H}_I = \sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{P}^{a\ 2}}{2m} + \frac{m}{2} \sum_{a=1}^N \mathbf{R}^a \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}^a + \sum_{a=1}^N \sum_{b>a}^N U(|\mathbf{R}^a - \mathbf{R}^b|). \tag{1.11b}$$

Ponieważ zmienne środka masy mają znikające nawiasy Poissona z pozostałymi zmiennymi, to znikają również nawiasy $\{R_i, \mathcal{H}_I\} = \{P_i, \mathcal{H}_I\} = 0$. Tym samym ruch środka masy jest całkowicie opisany przez hamiltonian \mathcal{H}_{CM} , który jest taki sam jak hamiltonian opisujący dynamikę pojedynczej cząstki o masie mN w zadanym zewnętrznym potencjale harmonicznym.

2 Separacja dynamiki kwantowej

Analogicznej separacji możemy dokonać w przypadku kwantowego nierelatywistycznego układu N nierozróżnialnych cząstek. Najłatwiej to zauważyć używając formalizmu drugiej kwantyzacji w obrazie Schrödingera, gdzie wszystkie operatory są niezależne od czasu. Wprowadzamy zatem operatory pola $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ i $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ spełniające odpowiednie relacje (anty)komutacyjne²:

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right]_{\pm} = \hat{N} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.12a)$$

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}') \right]_{\pm} = \left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right]_{\pm} = 0, \quad (1.12b)$$

gdzie operator liczby cząstek \hat{N} zdefiniowany jest następująco:

$$\hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (1.13)$$

Kwantowy hamiltonian rozważanego układu cząstek zapisujemy w tym formalizmie następująco:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \\ &+ \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.14)$$

gdzie tak jak poprzednio macierz \hat{V} jest symetryczna i może zależeć od czasu. Można pokazać, że dla tak zdefiniowanego hamiltonianu operator liczby cząstek \hat{N} jest stałą ruchu, tzn. jest przemienny z tym hamiltonianem.

Tak jak zostało pokazane w pracy [18] rozseparowanie hamiltonianu nastąpi jeśli wprowadzimy nowe operatory (odpowiedniki współrzędnych w układzie środka masy) i wprowadzimy nowe (przesunięte) współrzędne:

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{\hat{N}} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (1.15a)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}), \quad (1.15b)$$

$$\mathbf{r}_c = \mathbf{r} - \hat{\mathbf{R}}, \quad (1.15c)$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla_c = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{1}{\hat{N}} \hat{\mathbf{P}}. \quad (1.15d)$$

Oprócz tego, że operator liczby cząstek \hat{N} jest stałą ruchu, to dodatkowo jest on przemienny z operatorem położenia środka masy $\hat{\mathbf{R}}$ i całkowitego pędu $\hat{\mathbf{P}}$. Natomiast operatory $\hat{\mathbf{R}}$ i $\hat{\mathbf{P}}$ spełniają następującą relację (wynikającą z tego, że $[r_i, \partial_j] = -\delta_{ij}$):

$$\left[\hat{R}_i, \hat{P}_j \right] = i\hbar \hat{N} \delta_{ij}. \quad (1.16)$$

²Zgodnie z twierdzeniem o związku spinu ze statystyką komutatory są w przypadku bozonów, a antykomutatory w przypadku fermionów.

Dodatkowo operatory te komutują z operatorami pola w następujący sposób:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\psi}(\mathbf{r})] &= \frac{1}{\hat{N}} \int d^3\mathbf{r}' [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \mathbf{r}' \hat{\psi}(\mathbf{r}'), \hat{\psi}(\mathbf{r})] = \\
&= \frac{1}{\hat{N}} \int d^3\mathbf{r}' [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'), \hat{\psi}(\mathbf{r})] \mathbf{r}' \hat{\psi}(\mathbf{r}') = \\
&= -\frac{1}{\hat{N}} \int d^3\mathbf{r}' \hat{N} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{r}' \hat{\psi}(\mathbf{r}') = \\
&= -\mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}), \tag{1.17a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\psi}(\mathbf{r})] &= \frac{\hbar}{i} \int d^3\mathbf{r}' [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r}'), \hat{\psi}(\mathbf{r})] = \\
&= \frac{\hbar}{i} \int d^3\mathbf{r}' [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'), \hat{\psi}(\mathbf{r})] \nabla_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r}') = \\
&= -\frac{\hbar}{i} \int d^3\mathbf{r}' \hat{N} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r}') = \\
&= i\hbar \hat{N} \nabla \hat{\psi}(\mathbf{r}). \tag{1.17b}
\end{aligned}$$

Analogicznie jak w przypadku klasycznym każdą część hamiltonianu można formalnie podzielić dwie części:

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r}_c \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_c) \mathbf{r}_c \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r}_c \hat{\psi}(\mathbf{r}_c) + \\
&+ \hat{N} \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\mathbf{R}}, \tag{1.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{r}_c \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_c) \nabla_c^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}_c) + \\
&- \frac{1}{\hbar^2 \hat{N}} \hat{\mathbf{P}}, \tag{1.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \\
&= \int \int d^3\mathbf{r}_c d^3\mathbf{r}'_c \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_c) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'_c) U(|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}'_c|) \hat{\psi}(\mathbf{r}'_c) \hat{\psi}(\mathbf{r}_c). \tag{1.20}
\end{aligned}$$

Zatem analogicznie jak dla dynamiki klasycznej (1.10) możemy zapisać hamiltonian jako:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{CM} + \hat{\mathcal{H}}_I, \tag{1.21}$$

gdzie:

$$\hat{\mathcal{H}}_{CM} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m\hat{N}} + \frac{m\hat{N}}{2} \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\mathbf{R}}, \tag{1.22a}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_I &= \int d^3\mathbf{r}_c \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_c) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla_c^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{r}_c \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r}_c \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}_c) + \\
&+ \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{r}_c d^3\mathbf{r}'_c \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_c) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'_c) U(|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}'_c|) \hat{\psi}(\mathbf{r}'_c) \hat{\psi}(\mathbf{r}_c). \tag{1.22b}
\end{aligned}$$

Tak zapisany hamiltonian opisuje dynamikę dwóch układów, z których jeden (ten opisujący dynamikę środka masy) w ogóle nie zależy od dynamiki wewnętrznej układu. Jest tak dlatego, że operatory położenia środka masy $\hat{\mathbf{R}}$ oraz całkowitego pędu $\hat{\mathbf{P}}$ komutują z hamiltonianem $\hat{\mathcal{H}}_I$. Istotnie, wykorzystując relacje (1.16) i (1.17) otrzymujemy:

$$\left[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathcal{H}}_I \right] = \left[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathcal{H}} \right] - \left[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathcal{H}}_{CM} \right] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{P}} - \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{P}} = 0, \quad (1.23a)$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathcal{H}}_I \right] = \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathcal{H}} \right] - \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathcal{H}}_{CM} \right] = -i\hbar m \hat{N}^2 \hat{V} \cdot \hat{\mathbf{R}} + i\hbar m \hat{N}^2 \hat{V} \cdot \hat{\mathbf{R}} = 0. \quad (1.23b)$$

W tym miejscu należy podkreślić, że separacja ruchu środka masy zachodzi dla dowolnej zależności macierzy \hat{V} od czasu.

Rozdział 2

Dynamika cząstki w obracającej się pułapce harmoniczej

W tym rozdziale zostanie przedyskutowana dynamika klasycznej cząstki w jednostajnie obracającym się trójwymiarowym potencjale harmonicznym. Jak wynika z analizy przedstawionej w poprzednim rozdziale dokładnie taka sama dynamika opisuje ruch środka masy dowolnej liczby klasycznych cząstek oddziałujących siłami zależnymi tylko od odległości między nimi, jak również ruch środka masy dowolnego układu kwantowo-mechanicznego.

Jest zatem jasne, że dokładne zrozumienie dynamiki klasycznej w takim potencjale jest bardzo ważne w całej analizie problemu dynamiki układu oddziałującego, a jak się okazuje nie jest ona do końca znana w literaturze (patrz [3]), choćby ze względu na uproszczenia jakich się zawsze w takiej analizie dokonuje.

Zajmujemy się dynamiką cząstki w trójwymiarowym dowolnie asymetrycznym potencjale harmonicznym, obracającym się wokół ustalonego kierunku w przestrzeni, ale dowolnie zorientowanego względem osi głównych pułapki. Szczególnym przypadkiem naszej analizy (który również zostanie przedyskutowany) jest obrót wokół jednej z osi głównych pułapki, który jest standardowym podejściem w dotychczasowych pracach [4, 5].

1 Układ obracający się

1.1 Równania ruchu

Układ obracający się nie jest układem inercjalnym. Nie jest zatem w nim spełniona II zasada dynamiki. Taki układ jest scharakteryzowany w układzie inercjalnym przez antysymetryczny tensor drugiego rzędu zwany prędkością kątową $\hat{\Omega}$. Oczywiście prędkość kątowa (jak każdy tensor antysymetryczny w trójwymiarowej przestrzeni) jest stowarzyszona z pewnym pseudo-wektorem Ω zwanym wektorem prędkości kątowej poprzez relację:

$$\Omega^i = \epsilon^{ijk} \Omega_{jk}, \quad (2.1)$$

gdzie $\hat{\epsilon}$ jest całkowicie antysymetrycznym tensorem Levi-Civity. Czasami przydatne jest również zapisanie wektora prędkości kątowej jako: $\Omega = \Omega \mathbf{n}$, gdzie \mathbf{n} jest wektorem jednostkowym

wskazującym kierunek osi obrotu, a Ω jest długością wektora prędkości kątowej.

Prędkość kątowa pozwala nam przeliczać ewolucję dowolnej wielkości wektorowej z układu inercyjnego do obracającego się zgodnie ze wzorem:

$$\frac{d'}{d't} \mathbf{u} = \frac{d}{dt} \mathbf{u} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{u} \quad (2.2a)$$

lub inaczej poprzez wykorzystanie wektora prędkości kątowej Ω :

$$\frac{d'}{d't} \mathbf{u} = \frac{d}{dt} \mathbf{u} - \Omega \times \mathbf{u}. \quad (2.2b)$$

Zgodnie z tymi wzorami przekształcają się wszystkie wielkości wektorowe; w szczególności położenie i jego pochodne. Stosując dwukrotnie ten przepis do wektora położenia i wykorzystując II zasadę dynamiki do przyspieszenia mierzonego w układzie inercyjnym otrzymujemy odpowiednik II zasady dynamiki w układzie obracającym się zwany wzorem Coriolisa¹:

$$\frac{1}{m} \mathbf{F} = \ddot{\mathbf{r}} + 2\hat{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \hat{\Omega}^2 \cdot \mathbf{r}. \quad (2.3)$$

Drugi człon po prawej stronie tego równania historycznie nazywa się przyspieszeniem Coriolisa, a trzeci przyspieszeniem odśrodkowym.

1.2 Hamiltonian

Z punktu widzenia teoretycznego jak również praktycznego ważne jest, aby znaleźć hamiltonian, który prowadzi do wzoru Coriolisa (2.3). Wiemy, że w układzie inercyjnym do II zasady dynamiki prowadzi prosty hamiltonian:

$$\mathcal{H}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t). \quad (2.4)$$

Jeśli tylko $V(\mathbf{r}, t)$ jest energią potencjalną pola siły, tzn. $\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}, t)$.

Pokażemy teraz, że do wzoru Coriolisa prowadzi hamiltonian, który jest postaci (patrz np. [5]):

$$\mathcal{H}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{r} \cdot \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} + V(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

Kanoniczne równania Hamiltona dla takiego hamiltonianu mają postać:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m} \mathbf{p} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{r}, \quad (2.6a)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p}. \quad (2.6b)$$

¹Od tej pory kropka będzie oznaczała pochodną po czasie w układzie obracającym się.

Różniczkując pierwsze równanie, oraz wykorzystując równanie pierwsze i drugie do wyrugowania pędu kanonicznego otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
\ddot{\mathbf{r}} &= \frac{1}{m}\dot{\mathbf{p}} - \hat{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{m}\mathbf{F} - \frac{1}{m}\hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} - \hat{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{m}\mathbf{F} - \frac{1}{m}\hat{\Omega} \cdot (m\dot{\mathbf{r}} + m\hat{\Omega} \cdot \mathbf{r}) - \hat{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{m}\mathbf{F} - 2\hat{\Omega} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \hat{\Omega}^2 \cdot \mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Widzimy zatem, że aby opisywać pewien układ zadany jakimś hamiltonianem w układzie obracającym się należy do hamiltonianu dodać człon $\mathbf{r} \cdot \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p}$, który jest sprzężeniem momentu pędu do prędkości kątowej pułapki: $\hat{\Omega} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})$.

2 Obracający się potencjał harmoniczny

Energia potencjalna w trójwymiarowym potencjale harmonicznym jest formą kwadratową wychylenia cząstki ze stanu równowagi. Jeżeli taki potencjał się obraca, to jedyna zmiana jest taka, że owa forma zależy od czasu. Pozostaje jednak nadal formą kwadratową wychyleń. Zatem hamiltonian cząstki w obracającym się potencjale harmonicznym zadany jest następująco:

$$\mathcal{H}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}\mathbf{r} \cdot \hat{V}(t) \cdot \mathbf{r}. \tag{2.8}$$

Widać, że znaczenie fizyczne ma jedynie część symetryczna macierzy $\hat{V}(t)$ dlatego od tej pory będziemy zakładali, że macierz ta po prostu jest symetryczna. Aby opisywała ona układ harmoniczny musi być dodatnio-określona, aby hamiltonian miał minimum i tym samym ruch był faktycznie harmoniczny.

Aby uprościć dalsze rozumowanie wygodnie jest opisywać nasz układ w układzie współobracającym się z potencjałem, w którym potencjał nie zależy od czasu. Zgodnie z argumentami przedstawionymi w podrozdziale (1.2) hamiltonian w tym układzie ma postać:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{r} \cdot \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} + \frac{m}{2}\mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r}. \tag{2.9}$$

Hamiltonian ten już nie zależy od czasu, bo jedyna taka zależność była w potencjale, który się obracał.

Dodatkowo w tym układzie możemy wybrać układ współrzędnych w ten sposób, aby macierz potencjału \hat{V} była diagonalna (jest bowiem macierzą symetryczną). Prędkość kątowa jest oczywiście nadal macierzą antysymetryczną. Sparametryzujemy macierz potencjału i prędkość kątową następująco:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_y & 0 \\ 0 & 0 & V_z \end{pmatrix}, \quad \hat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z & \Omega_y \\ \Omega_z & 0 & -\Omega_x \\ -\Omega_y & \Omega_x & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.10}$$

Kanoniczne równania ruchu zadane przez hamiltonian (2.9) mają postać:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{m}\mathbf{p} - \hat{\Omega}\cdot\mathbf{r}, \quad (2.11a)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -m\hat{V}\cdot\mathbf{r} - \hat{\Omega}\cdot\mathbf{p}. \quad (2.11b)$$

3 Stałe ruchu

Z punktu widzenia prostoty opisu ruchu, jak również wiedzy na temat samej dynamiki ważne jest aby znać stałe ruchu występujące w problemie. Znajomość bowiem stałych ruchu zdradza nam nie tylko jak w prosty sposób można dynamikę scharakteryzować, ale również mówi nam o symetriach układu. Dlatego teraz zajmę się problemem istnienia stałych ruchu w naszym układzie.

3.1 Liniowe stałe ruchu

Na początek sprawdźmy, czy w naszym układzie występują stałe ruchu liniowe w położeniach i pędach. Najbardziej ogólna taka stała ruchu musi być postaci:

$$\mathcal{C} = \boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{p}, \quad (2.12)$$

gdzie wektory $\boldsymbol{\eta}$ i $\boldsymbol{\xi}$ są pewnymi parametrami charakteryzującymi naszą wielkość. Różniczkując tą wielkość po czasie i wykorzystując równania ruchu (2.11) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} 0 = \dot{\mathcal{C}} &= \boldsymbol{\eta}\cdot\dot{\mathbf{r}} + \boldsymbol{\xi}\cdot\dot{\mathbf{p}} = \\ &= \boldsymbol{\eta}\cdot\left(\frac{1}{m}\mathbf{p} - \hat{\Omega}\cdot\mathbf{r}\right) + \boldsymbol{\xi}\cdot\left(-m\hat{V}\cdot\mathbf{r} - \hat{\Omega}\cdot\mathbf{p}\right) = \\ &= \left(\hat{\Omega}\cdot\boldsymbol{\eta} - m\hat{V}\cdot\boldsymbol{\xi}\right)\cdot\mathbf{r} + \left(\hat{\Omega}\cdot\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{m}\boldsymbol{\eta}\right)\cdot\mathbf{p}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Żądanie, aby wielkość \mathcal{C} była stałą ruchu jest zatem równoważne z żądaniem, aby był spełniony poniższy układ równań na parametry $\boldsymbol{\xi}$ i $\boldsymbol{\eta}$:

$$0 = \hat{\Omega}\cdot\boldsymbol{\eta} - m\hat{V}\cdot\boldsymbol{\xi}, \quad (2.14a)$$

$$0 = \hat{\Omega}\cdot\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{m}\boldsymbol{\eta}. \quad (2.14b)$$

Wyznaczając z równania (2.14b) wielkość $\boldsymbol{\eta}$ i wstawiając do równania (2.14a) otrzymujemy natychmiast równanie:

$$\left(\hat{\Omega}^2 + \hat{V}\right)\cdot\boldsymbol{\xi} = 0. \quad (2.15)$$

Równanie to w ogólności nie może być spełnione (poza trywialnym przypadkiem $\boldsymbol{\xi} = 0$). Jednak występująca tu macierz $\hat{\Omega}^2 + \hat{V}$ dla pewnych wartości prędkości kątowej Ω jest zdegenerowana. Istotnie, w naszej parametryzacji ma ona postać:

$$\hat{\Omega}^2 + \hat{V} = \begin{pmatrix} V_x - \Omega_y^2 - \Omega_z^2 & \Omega_x\Omega_y & \Omega_x\Omega_z \\ \Omega_x\Omega_y & V_y - \Omega_z^2 - \Omega_x^2 & \Omega_y\Omega_z \\ \Omega_x\Omega_z & \Omega_y\Omega_z & V_z - \Omega_x^2 - \Omega_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Degeneracja występuje gdy prędkość kątowna pułapki zeruje wyznacznik tej macierzy, tzn. gdy spełnione jest równanie dwukwadratowe:

$$0 = \text{Det}(\hat{\Omega}^2 + \hat{V}) = -\Omega^2 (\text{Tr}(\hat{V}) - \Omega^2) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} + \Omega^2 \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n} + \text{Det}(\hat{V}). \quad (2.17)$$

Warunek ten wyznacza nam dwie charakterystyczne częstotliwości w naszym problemie dane wzorem:

$$\Omega_{\pm} = \sqrt{\frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}, \quad (2.18)$$

gdzie $a = \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n}$, $b = \text{Tr}(\hat{V}) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n}$ i $c = \text{Det}(\hat{V})$. Ponieważ parametry a , b i c są dodatnie to wyznaczone w ten sposób częstotliwości są rzeczywiste.

Jak się okaże w podrozdziale (5.1) pomiędzy tymi częstotliwościami leży tzw. pierwszy obszar niestabilności, w którym układ ma niestabilne rozwiązania, a wyznaczone tutaj częstotliwości Ω_{\pm} wyznaczają takie prędkości obrotu pułapki, dla których dodatkowa stała ruchu związana jest z pojawiającą się wtedy swobodną dynamiką.

3.2 Kwadratowe stałe ruchu

Podobną analizę możemy przeprowadzić dla wielkości, które są kwadratowymi formami położeń i pędów. Najogólniejszą postać takiej wielkości można zapisać następująco:

$$\mathcal{C} = \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{U} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \hat{W} \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{2m} \mathbf{p} \cdot \hat{T} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.19)$$

gdzie macierze \hat{U} , \hat{W} i \hat{T} są parametrami charakteryzującymi naszą zachowaną wielkość. Bez zmniejszania ogólności możemy przyjąć, że macierze \hat{T} i \hat{U} są symetryczne, gdyż ich części antysymetryczne nie wnoszą żadnego wkładu do wielkości \mathcal{C} . Postępując analogicznie jak w poprzednim przypadku obliczamy pochodną tej wielkości po czasie i wykorzystujemy równania ruchu (2.11) otrzymując:

$$\begin{aligned} 0 = \dot{\mathcal{C}} &= m \dot{\mathbf{r}} \cdot \hat{U} \cdot \mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \hat{W} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{r} \cdot \dot{\hat{W}} \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{m} \dot{\mathbf{p}} \cdot \hat{T} \cdot \mathbf{p} = \\ &= \left(\frac{1}{m} \mathbf{p} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{r} \right) \cdot \left(m \hat{U} \cdot \mathbf{r} + \hat{W} \cdot \mathbf{p} \right) + \\ &\quad + \left(\mathbf{r} \cdot \hat{W} + \frac{1}{m} \mathbf{p} \cdot \hat{T} \right) \cdot \left(-m \hat{V} \cdot \mathbf{r} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} \right) = \\ &= m \mathbf{r} \cdot \left(\hat{\Omega} \cdot \hat{U} - \hat{W} \cdot \hat{V} \right) \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \left(\left[\hat{\Omega}, \hat{W} \right] + \hat{U} - \hat{V} \cdot \hat{T} \right) \cdot \mathbf{p} + \\ &\quad + \frac{1}{m} \mathbf{p} \cdot \left(\hat{W} - \hat{T} \cdot \hat{\Omega} \right) \cdot \mathbf{p}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Żądając zatem, aby wielkość \mathcal{C} była stała w czasie otrzymujemy układ równań²:

$$0 = [\hat{\Omega}, \hat{U}] - \hat{W} \cdot \hat{V} - \hat{V} \cdot \hat{W}^T, \quad (2.21a)$$

$$0 = [\hat{\Omega}, \hat{W}] + \hat{U} - \hat{V} \cdot \hat{T}, \quad (2.21b)$$

$$0 = [\hat{\Omega}, \hat{T}] + \hat{W} + \hat{W}^T. \quad (2.21c)$$

Jest to układ równań liniowych na macierze \hat{U} , \hat{T} i \hat{W} . Rozwiązanie takiego układu nie jest trudne koncepcyjnie, ale żmudne. Dlatego do jego rozwiązania użyłem programu do obliczeń symbolicznych *Maple 8*. Szczegółowy sposób rozwiązywania tego układu przedstawiony jest w dodatku A. Tutaj podam tylko wynik tej analizy.

Okazuje się, że ten układ równań można spełnić na trzy niezależne sposoby, a macierze opisujące nasze stałe ruchu można wyrazić w sposób niezależny ani od ich parametryzacji ani od wyboru układu współrzędnych:

1. stała zerowego rzędu³ - hamiltonian

$$\mathcal{C}_1 = \begin{cases} \hat{T} & = \hat{I} \\ \hat{U} & = \hat{V} \\ \hat{W} & = \hat{\Omega} \end{cases} \quad (2.22a)$$

Oczywiście takiego wyniku należało się spodziewać, gdyż w układzie obracającym się hamiltonian nie zależy od czasu i tym samym jest stałą ruchu.

2. stała pierwszego rzędu

$$\mathcal{C}_2 = \begin{cases} \hat{T} & = \hat{V} - 3\hat{\Omega}^2 \\ \hat{U} & = \hat{V}^2 - \hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 - \hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} - \hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} \\ \hat{W} & = \hat{\Omega} \cdot \hat{V} + 2\hat{V} \cdot \hat{\Omega} - \hat{\Omega}^3 \end{cases} \quad (2.22b)$$

3. stała drugiego rzędu

$$\mathcal{C}_3 = \begin{cases} \hat{T} & = 3\hat{V}^2 + 4\hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} + 4\hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 + \hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} + 8\hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} + \\ & -13 \text{Tr}(\hat{V})(\hat{\Omega}^2 \hat{I} - \hat{\Omega}^2) \\ \hat{U} & = 3\hat{V}^3 - 2\hat{V} \cdot \hat{\Omega}^4 - 2\hat{\Omega}^4 \cdot \hat{V} + 3\hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 - \hat{\Omega}^2 \hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} + \\ & -3\hat{V}^2 \cdot \hat{\Omega}^2 - 3\hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V}^2 - 3\hat{\Omega} \cdot \hat{V}^2 \cdot \hat{\Omega} - 9\hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} - 6\hat{V} \cdot \hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} + \\ & -6\hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} \cdot \hat{V} - 5\hat{\Omega}^2 \hat{V}^2 + 13 \text{Tr}(\hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2) \hat{V} \\ \hat{W} & = -2\hat{\Omega}^5 - 2\hat{V} \cdot \hat{\Omega}^3 + 2\hat{\Omega}^3 \cdot \hat{V} + 7\hat{\Omega}^2 \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} + 4\hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 + \\ & + 3\hat{\Omega} \cdot \hat{V}^2 + 6\hat{V} \cdot \hat{\Omega} \cdot \hat{V} + 6\hat{V}^2 \cdot \hat{\Omega} \end{cases} \quad (2.22c)$$

²Wykorzystujemy fakt, że dla wielkości stojących pomiędzy dwoma położeniami lub dwoma pędami istotne są tylko ich części symetryczne.

³Rzędem stałej ruchu określamy wymiar macierzy \hat{T} w jednostkach kwadratu częstości.

Istnienie trzech stałych ruchu kwadratowych w położeniach i pędach nie powinno nas dziwić. Nasz układ jest bowiem kanonicznie równoważny układowi trzech niezależnych oscylatorów harmonicznym, których struktura jest zaprezentowana w dalszej analizie. Tym samym mamy tak naprawdę trzy hamiltoniany jednowymiarowych oscylatorów i każdy z nich jest stałą ruchu w naszym problemie. Transformacja kanoniczna łącząca nasz układ ze wspomnianym układem niezależnych oscylatorów jest liniowa. Znalezienie jednak jej jawnej postaci z praktycznego punktu widzenia jest niewykonalne. Znajomość trzech stałych ruchu w naszym problemie daje natomiast pełną informację o zachowanych wielkościach, a nieznane hamiltoniany są *nadal nieznaną* kombinacją liniową tych stałych.

Przypadek zdegenerowany

Jeśli wektor prędkości kątowej pułapki jest równoległy do jednej z jej osi głównych wyznaczone powyżej stałe ruchu stają się liniowo zależne. Jest tak dlatego, że ruch w kierunku osi obrotu całkowicie się wtedy oddziela od reszty dynamiki i energia drgań w tym kierunku staje się jedną ze stałych ruchu. Wtedy pozostajemy z problemem dwuwymiarowej pułapki harmonicznnej obracającej się wokół osi prostopadłej do płaszczyzny pułapki. Układ taki ma dwie stałe ruchu kwadratowe w pędach i położeniach określone przez układ równań (2.21). Mają one postać:

1. stała zerowego rzędu - hamiltonian

$$\mathcal{C}_1 = \begin{cases} \hat{T} &= \hat{I} \\ \hat{W} &= \hat{\Omega} \\ \hat{U} &= \hat{V} \end{cases} \quad (2.23a)$$

Oczywiście hamiltonian całego układu nadal ma tę samą postać, z tym że prędkość kątowa $\hat{\Omega}$ jest teraz macierzą dwuwymiarową postaci:

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}.$$

Warto zauważyć już w tym miejscu, że z tego powodu przypadek dwuwymiarowy jest dużo łatwiejszy do rozpatrywania od przypadku ogólnego - trójwymiarowego. W tym przypadku bowiem kwadrat prędkości kątowej jest macierzą proporcjonalną do macierzy jednostkowej i tym samym jest przemienny ze wszystkimi innymi macierzami.

2. stała pierwszego rzędu

$$\mathcal{C}_2 = \begin{cases} \hat{T} &= \hat{V} \\ \hat{W} &= \hat{\Omega} \cdot \hat{V} + 2\hat{V} \cdot \hat{\Omega} + 2\hat{\Omega}^3 \\ \hat{U} &= \hat{V}^2 + \hat{V} \cdot \hat{\Omega}^2 - \hat{\Omega} \cdot \hat{V} \cdot \hat{\Omega} \end{cases} \quad (2.23b)$$

4 Rozwiązanie poprzez mody własne

4.1 Równanie charakterystyczne

Równania ruchu (2.11) są równaniami liniowymi. Dlatego naturalną drogą ich rozwiązywania jest poszukiwanie rozwiązań w postaci tzw. modów własnych. W tym celu zapisujemy równania

ruchu w postaci:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{r}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{\Omega} & \frac{1}{m}\hat{I} \\ -m\hat{V} & -\hat{\Omega} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{r}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

i wprowadzamy nowy, sześciowymiarowy wektor $\mathcal{R}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix}$ zbudowany z wektorów położenia i pędu. Rozwiązania liniowego równania ruchu (2.24) poszukujemy w postaci modu własnego - rozwiązania oscylacyjnego o częstotliwości ω :

$$\mathcal{R}(t) = \mathcal{R}_0 e^{i\omega t}. \quad (2.25)$$

Po wstawieniu do (2.24) otrzymujemy układ równań liniowych jednorodnych, który musi spełniać amplituda \mathcal{R}_0 :

$$\begin{pmatrix} -\hat{\Omega} - i\omega\hat{I} & \frac{1}{m}\hat{I} \\ -m\hat{V} & -\hat{\Omega} - i\omega\hat{I} \end{pmatrix} \cdot \mathcal{R}_0 = 0. \quad (2.26)$$

W ten sposób dostajemy warunek jaki musi spełniać częstość własna modu ω , bowiem nietrywialne rozwiązanie tego równania istnieje tylko wtedy, gdy wyznacznik macierzy mnożącej amplitudę \mathcal{R}_0 znika. Dostajemy zatem charakterystyczne równanie na częstości własne w zależności od parametrów pułapki, kierunku jej obrotu, oraz prędkości kątowej obrotu. Jak zostało pokazane w [18] ma ono postać:

$$\omega^6 + A\omega^4 + B\omega^2 + C = 0, \quad (2.27)$$

gdzie parametry równania dane są wzorami [18]:

$$A = -2\Omega^2 - \text{Tr}(\hat{V}), \quad (2.28a)$$

$$B = \Omega^4 + \Omega^2 \left[3\mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \text{Tr}(\hat{V}) \right] + \frac{\text{Tr}(\hat{V})^2 - \text{Tr}(\hat{V}^2)}{2}, \quad (2.28b)$$

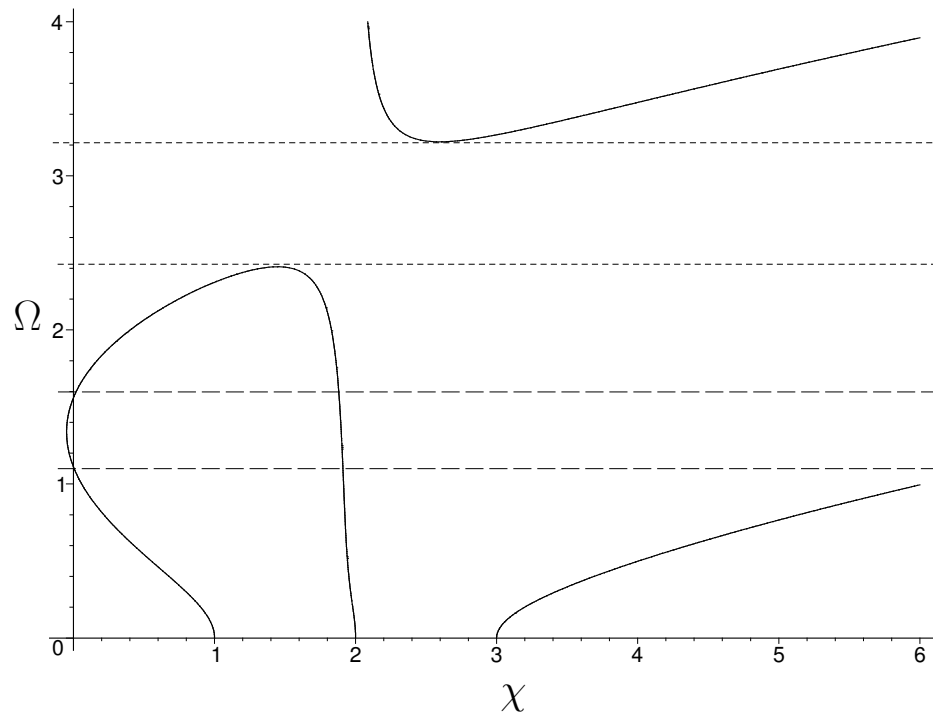
$$C = -\Omega^4 \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} + \Omega^2 \left[\text{Tr}(\hat{V}) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n} \right] - \text{Det}(\hat{V}). \quad (2.28c)$$

Widać, że równanie charakterystyczne jest funkcją kwadratu prędkości kątowej pułapki. To oznacza, że częstości charakterystyczne, tak jak należy się spodziewać, nie zależą od znaku prędkości obrotu Ω . Równanie (2.27) jest w istocie równaniem trzeciego stopnia na kwadraty częstości własnych poszczególnych modów $\chi = \omega^2$. Warto również zauważyć, że równanie charakterystyczne w tej parametryzacji w ogóle nie zależy od masy cząstki.

Częstości własne zależą od różnych parametrów, które możemy (przynajmniej teoretycznie) kontrolować w doświadczeniu: kierunek i prędkości obrotu pułapki i jej wartości własne. Jeśli mamy do czynienia z pułapką o ustalonych wartościach własnych i ustalony jest kierunek jej obrotu to jedynym parametrem, który możemy zmieniać jest prędkość obrotu Ω . W takiej sytuacji równanie charakterystyczne

$$Q(\chi, \Omega) = \chi^3 + A(\hat{V}, \Omega, \mathbf{n})\chi^2 + B(\hat{V}, \Omega, \mathbf{n})\chi + C(\hat{V}, \Omega, \mathbf{n}) \quad (2.29)$$

definiuje nam pewną krzywą na płaszczyźnie $\Omega\chi$ i pozwala graficznie odczytywać wartości własne drgającego układu (Rys.2.1).



Rysunek 2.1: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 2$ i $V_z = 3$ oraz kierunku obrotu zadany przez wektor jednostkowy $n_x = n_y = n_z = 1/\sqrt{3}$. Linie przerywane ograniczają pierwszy obszar niestabilności, w którym kwadrat jednej pary częstości własnych staje się ujemny. Natomiast pomiędzy kropkowanymi liniami znajduje się drugi obszar niestabilności, gdzie istnieje tylko jedno rzeczywiste rozwiązanie równania charakterystycznego.

5 Stabilność ruchu

Układ harmoniczny będziemy nazywamy stabilnym, gdy wszystkie jego mody własne (2.25) będą miały rzeczywiste częstości własne. Jest to bowiem warunek konieczny, aby drgania układu były ograniczone. Układ będzie zatem stabilny dla tych prędkości obrotu pułapki Ω , dla których wszystkie trzy pierwiastki wielomianu (2.29) będą rzeczywiste i dodatnie.

Jak widać na rys. 2.1 może się zdarzyć, że istnieje taki przedział prędkości obrotu Ω , dla którego dwie przeciwne częstości własne są urojone (ich kwadrat jest ujemny). To oznacza, że amplituda takich modów zmienia się wykładniczo w czasie - dla jednego modu narasta, dla drugiego wygasa. Ponieważ rozwiązanie (położenie i pęd w funkcji czasu) musi być wielkością rzeczywistą to jest ono kombinacją liniową tych dwóch rozwiązań (żadne z nich nie jest rzeczywiste) i w związku z tym układ będzie niestabilny. Zakres tych prędkości obrotu, dla których zachodzi taka sytuacja nazywamy *pierwszym obszarem niestabilności*.

W ogólności możemy mieć również do czynienia z *drugim obszarem niestabilności*. Widać bowiem na rysunku 2.1, że (przynajmniej dla tej konkretnej sytuacji) istnieje taki przedział prędkości obrotu, dla którego istnieje tylko jedno rzeczywiste rozwiązanie równania charaktery-

stycznego (2.29). Dwa pozostałe są zespolone i sprzężone do siebie⁴. W tym przypadku mamy do czynienia z innym typem niestabilności - występują oscylacje, których amplituda narasta z czasem.

Warto również zauważyć w tym miejscu, że dla odpowiednio dużej prędkości obrotu pułapki układ zawsze będzie stabilny. Jest to powszechnie znany efekt stabilizujących własności siły Coriolisa, którego najśmielszą realizacją jest tzw. pułapka Paula⁵.

Dokładne zbadanie występowania obszarów niestabilności jest przedmiotem dalszej dyskusji.

5.1 Pierwszy obszar niestabilności

Z pierwszym obszarem niestabilności mamy do czynienia, gdy jedno z rozwiązań równania charakterystycznego (2.29) jest ujemne. Obszar ten zaczyna się i kończy zatem dla takiej prędkości obrotu, przy której jedna z częstości własnych się zeruje. Iloczyn wszystkich trzech kwadratów częstości własnych jest dany przez wyraz wolny równania charakterystycznego wzięty z minusem $-C(\hat{V}, \Omega, \mathbf{n})$. Jest on wielomianem dwukwadratowym w prędkości kątowej pułapki Ω .

$$\omega_1^2 \omega_2^2 \omega_3^2 = \Omega^4 \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \Omega^2 (\text{Tr}(\hat{V}) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n}) + \text{Det}(\hat{V}). \quad (2.30)$$

Zatem pierwszy obszar niestabilności znajduje się pomiędzy miejscami zerowymi tego wielomianu ze względu na prędkość kątową pułapki. Wielomian ten ma miejsca zerowe jeśli wyróżnik tego równania Δ jest nieujemny (jeśli jest równy 0 to nie istnieje obszar, w którym częstość własna jest urojona). Pokażmy, że wyróżnik ten nigdy nie jest ujemny. W tym celu, bez zmniejszania ogólności wywodu, przejdźmy do układu współrzędnych, w którym pułapka jest diagonalna, a jej wartości własne spełniają związek $V_x \leq V_y \leq V_z$ i rozpiszmy ten wyróżnik w tym układzie.

$$\begin{aligned} \Delta &= (\text{Tr}(\hat{V}) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n})^2 - 4 \text{Det}(\hat{V}) \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} = \\ &= [(V_x + V_y + V_z)(n_x^2 V_x + n_y^2 V_y + n_z^2 V_z) - n_x^2 V_x^2 - n_y^2 V_y^2 - n_z^2 V_z^2]^2 + \\ &\quad - 4 V_x V_y V_z (n_x^2 V_x + n_y^2 V_y + n_z^2 V_z) = \\ &= [n_x^2 V_x (V_y + V_z) + n_y^2 V_y (V_x + V_z) + n_z^2 V_z (V_x + V_y)]^2 + \\ &\quad - 4 V_x V_y V_z (n_x^2 V_x + n_y^2 V_y + n_z^2 V_z) = \\ &= [n_x^2 V_x (V_z - V_y) + n_y^2 V_y (V_z - V_x) + n_z^2 V_z (V_x - V_y)]^2 + \\ &\quad + V_y V_z (V_z V_y n_z^2 n_y^2 + V_z V_x n_z^4 - V_x n_z^2 V_z + V_z V_x n_z^2 n_x^2 + V_y V_x n_y^4 + \\ &\quad - V_x n_y^2 V_y + n_x^4 V_x^2 + V_x^2 n_y^2 n_z^2 - n_x^2 V_x^2 + V_x^2 n_z^2 n_x^2 + V_y n_x^2 V_x n_y^2 + \\ &\quad + V_x^2 n_y^2 n_x^2) = |\text{Wykorzystujemy: } n_x^2 = 1 - n_y^2 - n_z^2| = \\ &= [n_x^2 V_x (V_z - V_y) + n_y^2 V_y (V_z - V_x) + n_z^2 V_z (V_x - V_y)]^2 + \\ &\quad + 4 n_y^2 n_z^2 V_y V_z (V_z - V_x) (V_y - V_x) \geq 0 \end{aligned} \quad (2.31)$$

Widzimy, że wyróżnik jest sumą dwóch nieujemnych wyrażeń, zatem nasze twierdzenie jest prawdziwe.

⁴Rozwiązania są sprzężone, bo współczynniki równania charakterystycznego są rzeczywiste.

⁵Paul za swój pomysł pułapkowania jonów otrzymał w 1989 Nagrodę Nobla z fizyki.

Warto zauważyć, że wyróżnik ten może się zerować w pewnych warunkach i tym samym pierwszy obszar niestabilności nie będzie występował. Może to zachodzić w dwóch przypadkach:

1. Pułapka jest częściowo symetryczna:

- jeśli $V_x = V_z$ to:

$$\Delta = n_x^2 V_z (V_z - V_y) + n_z^2 V_z (V_z - V_y) = V_z (V_z - V_y) (1 - n_y^2).$$

Zatem wyróżnik ten znika jeśli mamy obrót wokół trzeciej osi głównej pułapki $n_y = 1$ (sytuacja zaprezentowana na rysunku 2.2) lub gdy pułapka jest całkowicie symetryczna, tzn. $V_x = V_y = V_z$.

- jeśli $V_y = V_x$ lub $V_y = V_z$ to otrzymujemy analogiczne warunki obrotu wokół trzeciej osi głównej, odpowiednio $n_z = 1$ lub $n_x = 1$.

2. jeśli kierunek obrotu nie ma składowej n_y lub n_z :⁶

- jeśli $n_y = 0$ to:

$$\begin{aligned} \Delta &= [n_x^2 V_x (V_z - V_y) + (1 - n_x^2) V_z (V_x - V_y)]^2 = \\ &= [n_x^2 V_y (V_z - V_x) - V_z (V_y - V_x)]^2. \end{aligned}$$

Widać zatem, że wyróżnik znika jeśli:

$$n_x^2 = \frac{V_z (V_y - V_x)}{V_y (V_z - V_x)}, \quad (2.32a)$$

$$n_z^2 = \frac{V_x (V_z - V_y)}{V_y (V_z - V_x)}. \quad (2.32b)$$

Wielkości te automatycznie spełniają warunki $n_x^2 + n_z^2 = 1$ oraz $n_x^2 \leq 1$ dla dowolnych wartości własnych macierzy \hat{V} spełniających wcześniej wymagany warunek $V_x \leq V_y \leq V_z$. Przy tym warto zwrócić uwagę, że $n_x = 1$ zachodzi tylko dla $V_y = V_z$, a $n_z = 1$ tylko dla $V_x = V_y$.

Ten przypadek jest bardzo ciekawy, a zauważony dopiero w naszej pracy [1]. Znikanie bowiem pierwszego obszaru niestabilności zachodzi dla dowolnie asymetrycznej pułapki harmonicznej jeśli tylko odpowiednio wybierze się kierunek osi jej obrotu. Taka sytuacja jest zilustrowana na rysunku 2.3.

- jeśli $n_z = 0$ to:

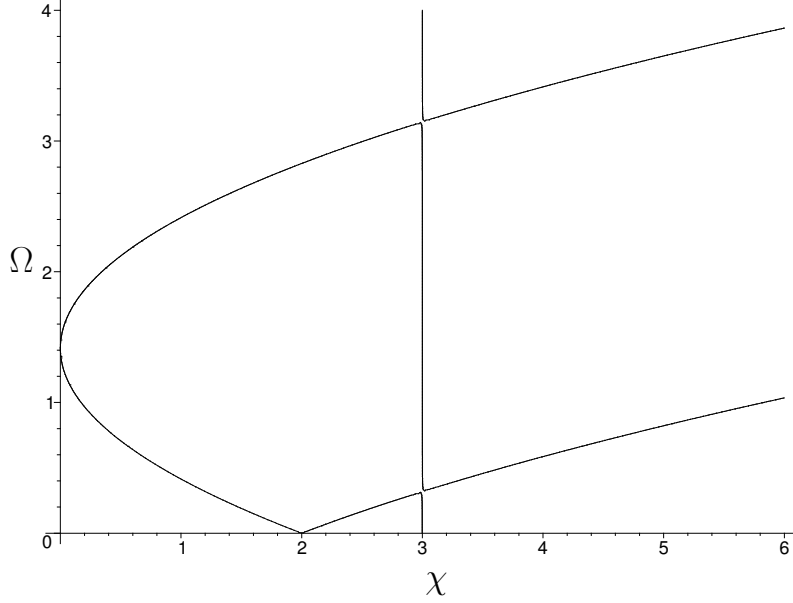
$$\begin{aligned} \Delta &= [n_x^2 V_x (V_z - V_y) + (1 - n_x^2) V_y (V_z - V_x)]^2 = \\ &= [n_x^2 V_z (V_x - V_y) + V_y (V_z - V_x)]^2 \end{aligned}$$

i warunek znikania wyróżnika

$$n_x^2 = \frac{V_y (V_z - V_x)}{V_z (V_y - V_x)} \quad (2.33)$$

spełnia warunek $n_x \leq 1$ tylko w trywialnych sytuacjach $V_x = V_y = V_z$ (i wtedy $n_x = 0$) oraz $V_y = V_z$ (wtedy $n_x = 1$).

⁶Taki warunek daje możliwość wyzerowania drugiego członu wyróżnika (2.31).



Rysunek 2.2: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = V_z = 2$ oraz $V_y = 3$. Obrót następuje wokół osi Y pułapki, tzn. wektor obrotu jest zadany przez $n_y = 1$, $n_x = n_z = 0$. W takim przypadku zeruje się wyróżnik (1) i pierwszy obszar niestabilności nie występuje.

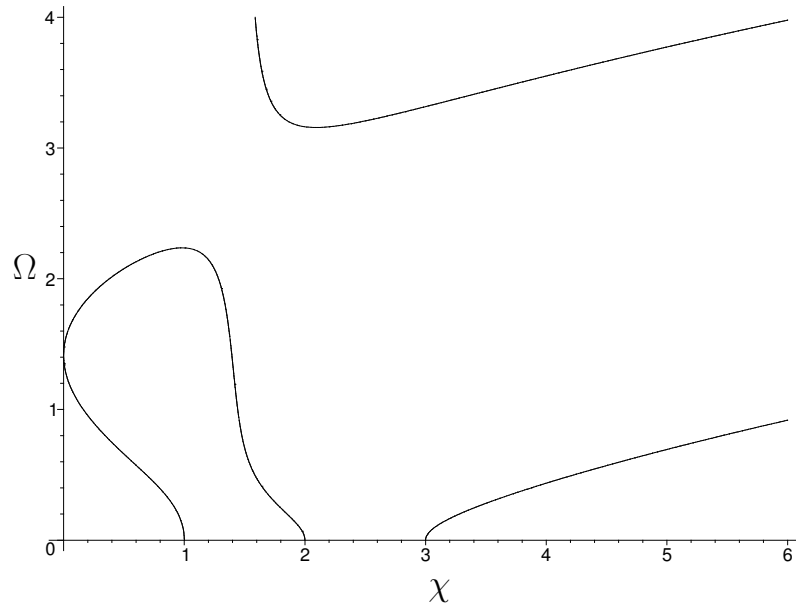
5.2 Punkty o podwyższonej symetrii

Warto zauważyć, że warunek występowania dodatkowej stałej ruchu (2.17) liniowej w położeniach i pędach jest równoważny zerowaniu się jednej z częstości własnych, co wynika ze wzoru (2.30). Tym samym dyskutowane wcześniej dodatkowe symetrie związane z dodatkową stałą ruchu pojawiają się dla tych prędkości obrotu pułapki, które ograniczają pierwszy obszar niestabilności. Dlatego punkty te nazywamy *punktami podwyższonej symetrii*.

Pojawienie się dodatkowej stałej ruchu jest oczywiście związane z dodatkową symetrią hamiltonianu. Aby pokazać istnienie tej stałej w naturalny sposób należałoby wykonać transformację kanoniczną do zmiennych opisujących poszczególne mody. W takich zmiennych część opisująca mod o zerowej częstości miałaby tylko część swobodną $\mathcal{H}_F = \frac{p_F^2}{2m}$.

Stosunkowo łatwo można podać taką transformację w przypadku zdegenerowanym - gdy obrót pułapki odbywa się wokół jednej z osi głównych. Bez zmniejszania ogólności możemy przyjąć wtedy, że obrót następuje wokół osi z z prędkością kątową $\sqrt{V_x}$, dla której mamy do czynienia z punktem o podwyższonej symetrii. Hamiltonian takiego układu ma wtedy postać (dla uproszczenia $m = 1$):

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{p_z^2}{2} + \frac{V_x x^2}{2} + \frac{V_y y^2}{2} + \frac{V_z z^2}{2} + \sqrt{V_x}(xp_y - yp_x). \quad (2.34)$$



Rysunek 2.3: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 2$ i $V_z = 3$ oraz kierunku obrotu zadanym przez wektor jednostkowy $n_x = \sqrt{3}/2$, $n_y = 0$, $n_z = 1/2$. Taki kierunek obrotu spełnia warunki zerowania wyróżnika (2.32). Jak widać w tym przypadku nie występuje pierwszy obszar niestabilności nawet dla pułapki asymetrycznej.

Nowe zmienne kanoniczne, które rozseparowują taki hamiltonian mają postać:

$$R_1 = \frac{1}{\sqrt{(3V_x + V_y)(V_y - V_x)}} \left[(V_x + V_y)x - 2\sqrt{V_x}p_y \right], \quad (2.35a)$$

$$P_1 = \sqrt{\frac{V_y - V_x}{3V_x + V_y}} (p_x + \sqrt{V_x}y), \quad (2.35b)$$

$$R_2 = \frac{1}{3V_x + V_y} \left[(V_x + V_y)y - 2\sqrt{V_x}p_x \right], \quad (2.35c)$$

$$P_2 = p_y + \sqrt{V_x}x, \quad (2.35d)$$

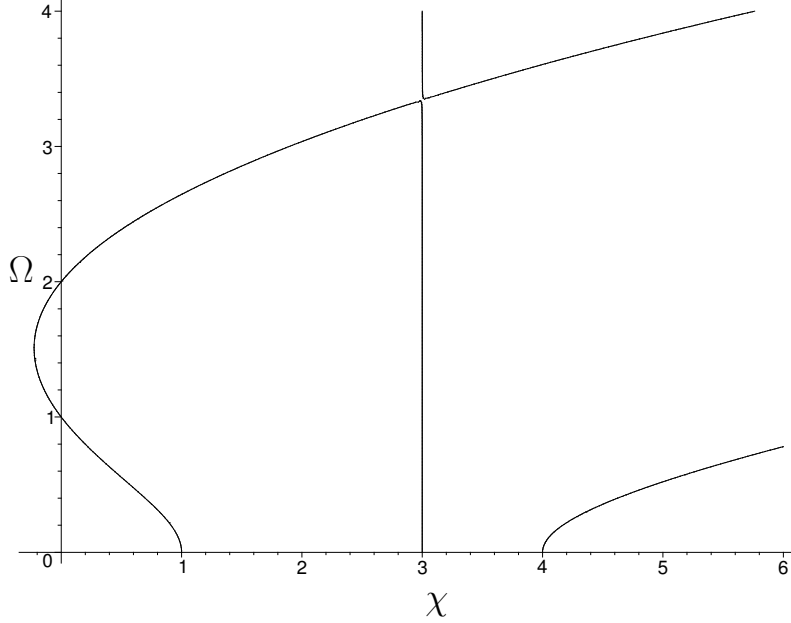
$$R_3 = z, \quad (2.35e)$$

$$P_3 = p_z. \quad (2.35f)$$

Łatwo sprawdzić, że jest to transformacja kanoniczna. Istotnie, mamy bowiem następujące nawiasy Poissona:

$$\{R_1, P_1\} = \frac{1}{\sqrt{(3V_x + V_y)(V_y - V_x)}} \sqrt{\frac{V_y - V_x}{3V_x + V_y}} (V_x + V_y + 2V_x) = 1, \quad (2.36a)$$

$$\{R_2, P_2\} = \frac{1}{3V_x + V_y} (2V_x + V_x + V_y) = 1, \quad (2.36b)$$



Rysunek 2.4: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 3$ i $V_z = 4$ w przypadku gdy obrót następuje wokół jednej z osi pułapki $n_x = n_z = 0$ i $n_y = 1$. Pierwszy obszar niestabilności jest ograniczony wtedy przez częstości $\Omega_- = \sqrt{V_x}$ oraz $\Omega_+ = \sqrt{V_z}$. Jest tak zawsze dla obrotów wokół jednej z osi. W ogólności szerokość pierwszego obszaru niestabilności zależy również od kierunku obrotu.

$$\{R_1, P_2\} = \{R_2, P_1\} = 0, \quad (2.36c)$$

$$\{R_1, R_2\} = \frac{1}{\sqrt{(3V_x + V_y)(V_y - V_x)}} \frac{-2\sqrt{V_x}(V_x + V_y) + 2\sqrt{V_x}(V_x + V_y)}{3V_x + V_y} = 0, \quad (2.36d)$$

$$\{P_1, P_2\} = \sqrt{\frac{V_y - V_x}{3V_x + V_y}} (-\sqrt{V_x} + \sqrt{V_x}) = 0. \quad (2.36e)$$

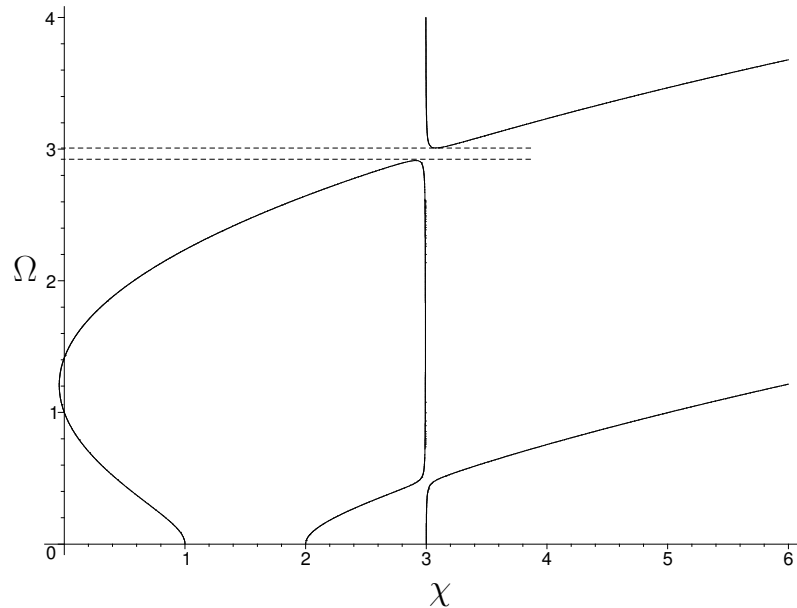
W tych nowych zmiennych kanonicznych hamiltonian (2.34) ma postać:

$$\mathcal{H} = \frac{P_1^2}{2} + \frac{P_2^2}{2} + \frac{P_3^2}{2} + \frac{(3V_x + V_y)}{2} R_2^2 + \frac{V_z}{2} R_3^2. \quad (2.37)$$

Widzimy zatem, że dynamika opisana zmiennymi (R_1, P_1) jest dynamiką swobodną, a mod uzupełniający drga z częstością $\sqrt{3V_x + V_y}$, a dodatkową stałą ruchu liniową w pędach (zgodnie z rozumowaniem w punkcie 3.1.) jest po prostu kanoniczny pęd P_1 .

5.3 Drugi obszar niestabilności

Drugi obszar niestabilności charakteryzuje się tym, że istnieje tylko jeden rzeczywisty pierwiastek wielomianu charakterystycznego (2.29). Dwa pozostałe są zespolone i sprzężone do siebie.



Rysunek 2.5: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 2$ i $V_z = 3$ przy minimalnym odchyleniu osi obrotu od osi pułapki, tzn. $n_x = \sin(1/20)$, $n_y = 0$ i $n_z = \cos(1/20)$. Widać, że natychmiast pojawił się drugi obszar niestabilności (pomiędzy przerywanymi liniami).

Na początek udowodnijmy następujące proste stwierdzenie: *jeśli obrót pułapki następuje wokół jednej z jej osi głównych, to drugi obszar niestabilności nie występuje*. Istotnie, założmy bez zmniejszania ogólności, że obrót następuje wokół osi z , tzn. w układzie współrzędnych, w którym macierz potencjału jest diagonalna kierunek obrotu jest zadany przez $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$. Wtedy wielomian charakterystyczny natychmiast się faktoryzuje do postaci:

$$Q(\chi) = [\chi^2 - \chi(2\Omega^2 + V_x + V_y) + \Omega^4 - \Omega^2(V_x + V_y) + V_x V_y] (\chi - V_z). \quad (2.38)$$

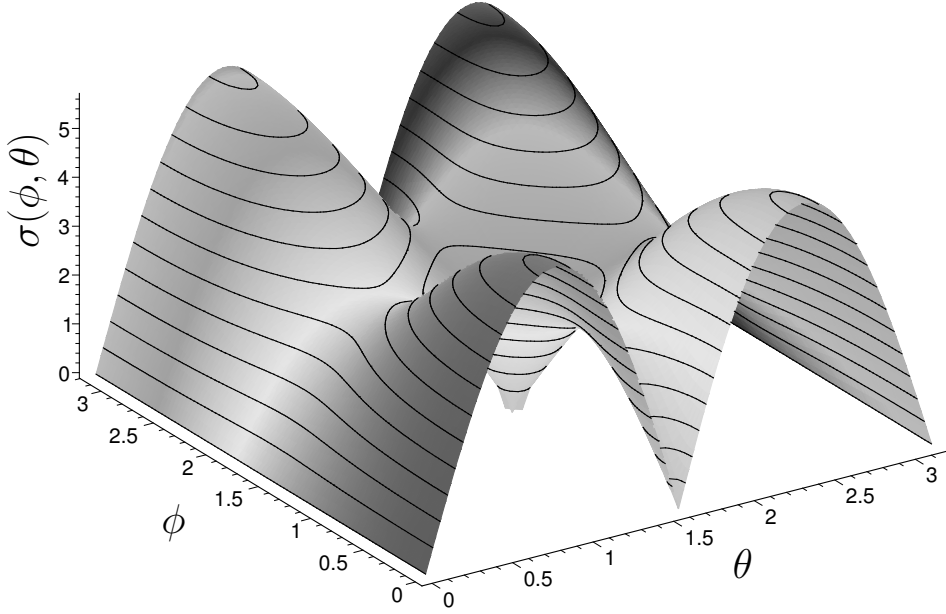
To co widać od razu, to fakt, że dynamika wzdłuż kierunku obrotu jest całkowicie niezależna od pozostałych stopni swobody, jak również od prędkości obrotu. Jest to oczywiste, gdyż obrót może zmieniać dynamikę tylko w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku obrotu. Pozostajemy więc w zasadzie z problemem dwuwymiarowym.

Równanie kwadratowe na kwadraty częstości własnych, które opisuje dynamikę w kierunku prostopadłym do osi obrotu ma rzeczywiste pierwiastki jeśli tylko następujący wyróżnik jest nieujemny:

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta} &= (2\Omega^2 + V_x + V_y)^2 - 4(\Omega^4 - \Omega^2(V_x + V_y) + V_x V_y) = \\ &= 8\Omega^2(V_x + V_y) + (V_x - V_y)^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Zatem faktycznie, dla obrotu wokół jednej z osi głównych pułapki drugi obszar niestabilności nie występuje.

Jeśli tylko oś obrotu jest odchylna od kierunku osi głównej (nawet minimalnie) natychmiast pojawia się drugi obszar niestabilności. Taką sytuację ilustruje rysunek 2.5.



Rysunek 2.6: Szerokość drugiego obszaru niestabilności w funkcji kierunku osi obrotu dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 2$ i $V_z = 3$. Kierunek osi obrotu określony przez kąty ϕ i θ związkami $n_x = \sin(\theta) \cos(\phi)$, $n_y = \sin(\theta) \sin(\phi)$ i $n_z = \cos(\theta)$. Widać, że drugi obszar niestabilności nie występuje tylko, gdy obrót następuje względem osi głównej pułapki.

Warunkiem istnienia drugiego obszaru niestabilności jest istnienie pierwiastków podwójnych wielomianu charakterystycznego (2.29) dla dwóch różnych prędkości obrotu pułapki. Wtedy bowiem drugi obszar niestabilności (jak widać choćby z rysunku 2.1) znajduje się między tymi prędkościami. Jak wiadomo z elementarnej algebry istnieje algorytm pozwalający sprawdzać istnienie miejsc zerowych wielomianów trzeciego stopnia (jakim jest (2.29)). Trzeba badać w tym celu wyróżnik wielomianu trzeciego stopnia postaci:

$$\Delta_3 = \left(\frac{A^3}{27} - \frac{AB}{6} + \frac{C}{2} \right)^2 + \left(\frac{3B - A^2}{9} \right)^3. \quad (2.40)$$

Łatwo się przekonać, że wyróżnik ten jest jednak wielomianem *piątego stopnia* w kwadracie prędkości obrotu pułapki i jedynie analiza numeryczna zagadnienia jest możliwa.

Dobrym parametrem charakteryzującym drugi obszar niestabilności jest jego szerokość, którą definiujemy jako różnicę kwadratów prędkości obrotu pułapki ograniczających ten obszar, tzn.: $\sigma = \Omega_{\uparrow}^2 - \Omega_{\downarrow}^2$ (linie kropkowane na rysunku 2.1). Dla ustalonej pułapki można badać zależność pomiędzy szerokością obszaru σ , a kierunkiem osi obrotu (rysunek 2.6). Z takiej analizy, która oczywiście nie jest ścisłym dowodem matematycznym, wynika, że drugi obszar niestabilności występuje zawsze, jeśli tylko obrót nie następuje wokół jednej z osi głównych pułapki.

6 Symulacja numeryczna dynamiki

Dobłą ilustracją do rozważań o różnych obszarach niestabilności i stabilności są symulacje numeryczne trajektorii cząstki znajdującej się w takiej pułapce. Symulacje realizowałem za pomocą samodzielnie napisanych programów (dodatek B).

6.1 Obrót zdegenerowany

Na początek rozważmy dynamikę cząstki w pułapce obracającej się wokół jednej ze swoich osi głównych. Jak było już dyskutowane na początku podrozdziału 5.3 w takim przypadku mamy do czynienia z całkowitą separacją dynamiki wzdłuż osi obrotu i do rozważenia pozostaje jedynie dynamika dwuwymiarowa w płaszczyźnie prostopadłej do osi obrotu. Jeśli przyjmiemy, że obrót następuje wokół osi z z prędkością kątową Ω to w płaszczyźnie prostopadłej do tej osi ruch (w układzie obracającym się) jest opisany przez dwa równania:

$$\ddot{x} = (\Omega^2 - V_x)x + 2\Omega\dot{y}, \quad (2.41a)$$

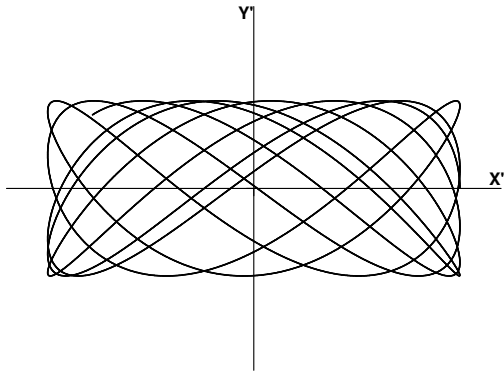
$$\ddot{y} = (\Omega^2 - V_y)y - 2\Omega\dot{x}. \quad (2.41b)$$

Równania te są oczywiście rozwiązywalne analitycznie. Mogą też służyć jako równania wyjściowe w analizie numerycznej. Zadając warunki początkowe można wykreślić trajektorie cząstki dla różnych prędkości obrotu pułapki Ω przy ustalonych parametrach pułapki (rysunek 2.7).

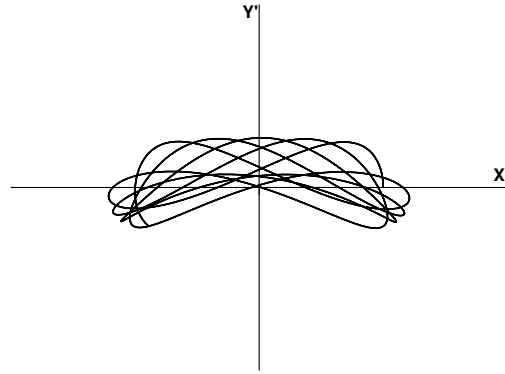
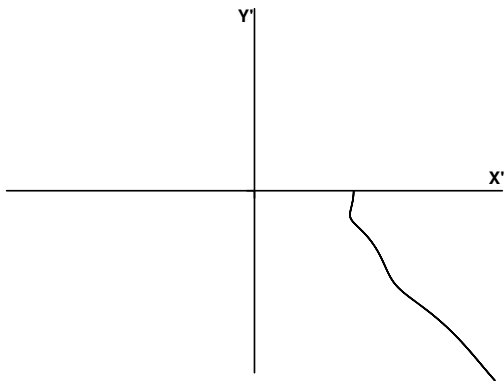
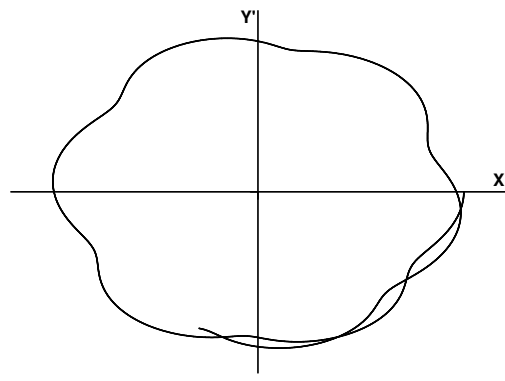
6.2 Obrót niezdegenerowany

W ogólności obrót pułapki może następować wokół dowolnie ustalonej osi względem osi głównych pułapki. W takim przypadku nie zachodzi separacja dynamiki, a dodatkowo pojawia się drugi obszar niestabilności. W takim przypadku równania ruchu są nadal liniowe, ale dużo bardziej skomplikowane.

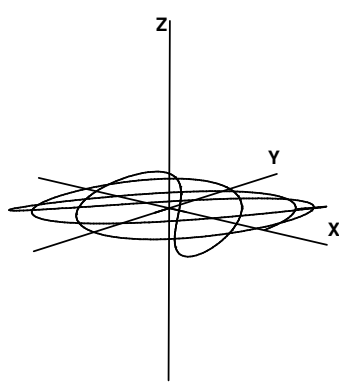
W tym przypadku trudno jest wyobrazić sobie obrót naszej pułapki i tym samym zrozumieć dynamikę w układzie obracającym się. Dlatego w tym przypadku wykreśliłem trajektorie obserwowane w układzie laboratoryjnym, w którym pułapka się obraca. Jak widać z rysunków 2.8 w tym przypadku również charakterystyka trajektorii zależy od obszaru (nie)stabilności.



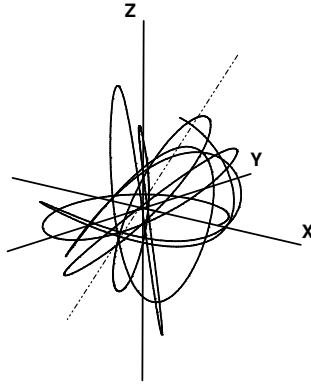
(a) Brak obrotu. Standardowa krzywa Lisajoussa.

(b) Powolny obrót ($\Omega = 0.2$). Pierwszy obszar *stabilności*.(c) Obrót destrukcyjny ($\Omega = 1.5$). Pierwszy obszar *niestabilności*.(d) Szybki obrót ($\Omega = 2$). Drugi obszar *stabilności*.

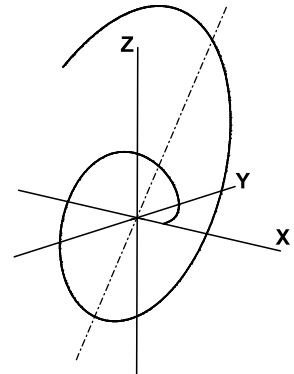
Rysunek 2.7: Trajektorie cząstki w płaszczyźnie prostopadłej do osi obrotu w pułapce o parametrach $V_x = 3$ i $V_y = 1$ w zależności od prędkości obrotu. Dla takiej pułapki pierwszy obszar niestabilności występuje w zakresie prędkości obrotu $\Omega \in (1, \sqrt{3})$. Widać zdecydowaną różnicę w dynamice pomiędzy pierwszym obszarem stabilności (gdzie dominującą rolę mają siły potencjału modyfikowane przez siłę odśrodkową) i drugim obszarem stabilności (gdzie funkcję stabilizującą pełni siła Coriolisa). Warunki początkowe wybrane jako: $x(0) = 1$, $y(0) = 0$, $\dot{x}(0) = 0$, $\dot{y}(0) = 1$ w przyjętych jednostkach. Osie nie są wyskalowane, gdyż w potencjałach harmonicznym (zgodnie z zasadą podobieństwa mechanicznego) wszystkie trajektorie są do siebie podobne, tzn. skalują się razem z warunkami początkowymi.



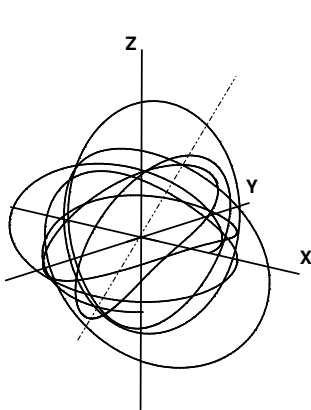
(a) ($\Omega = 0$) Brak obrotu. Ze względu na warunki początkowe ruch odbywa się wyłącznie w płaszczyźnie $X - Y$.



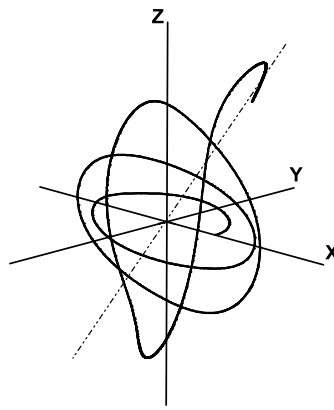
(b) ($\Omega = 0,1$) Powolny obrót. Pierwszy obszar stabilności.



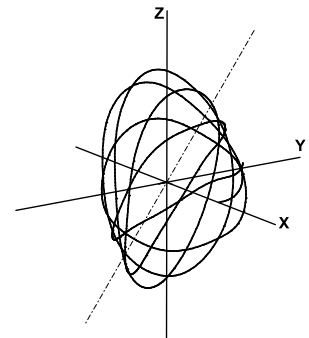
(c) ($\Omega = 1,5$) Obrót destrukcyjny. Pierwszy obszar niestabilności.



(d) ($\Omega = 2,1$) Obrót stabilizujący. Drugi obszar stabilności.



(e) ($\Omega = 2,9$) Obrót destrukcyjny w drugim obszarze niestabilności.



(f) ($\Omega = 4$) Stabilizacja bardzo szybkim obrotem.

Rysunek 2.8: Trajektorie cząstki w układzie laboratoryjnym znajdującej się w obracającej się pułapce o parametrach $V_x = 3$, $V_y = 2$ i $V_z = 1$. Kierunek obrotu zadany przez $n_x = 0$, $n_y = n_z = 1/\sqrt{2}$. Dla takiej pułapki pierwszy obszar niestabilności występuje w zakresie prędkości obrotu $\Omega \in (\frac{2\sqrt{3}}{3}, \sqrt{3})$, a drugi (z obliczeń numerycznych) w zakresie $\Omega \in (\sim 2,49; \sim 2,98)$. Widać zdecydowaną różnicę w dynamice pomiędzy pierwszym (wykładnicze narastanie amplitudy), a drugim (oscylacje narastające) obszarem niestabilności. Dodatkowo pierwszy obszar stabilności (przeważają siły pułapkujące) różni się od drugiego i trzeciego obszaru stabilności (rolę sił stabilizujących pełni siła Coriolisa). Widać również, że dla odpowiednio szybkiego obrotu ruch jest ustabilizowany. Linie przerywane określają oś obrotu pułapki. Warunki początkowe wybrane jako: $x(0) = 1$, $y(0) = z(0) = 0$, $\dot{x}(0) = \dot{z}(0) = 0$, $\dot{y}(0) = 1$ w przyjętych jednostkach.

Rozdział 3

Wpływ pola grawitacyjnego na dynamikę

Dotychczas dyskutowałem dynamikę cząstki znajdującej się jedynie pod wpływem obracającej się pułapki. Oczywiście w rzeczywistych eksperymentach (np. wykonywanych na kondensujących atomach w takich pułapkach) nie można pominąć wpływu pola grawitacyjnego. Owszem, jeśli obrót pułapki następuje wokół pionowej osi (tak było we wszystkich znanych mi doświadczeniach) wpływ ten jest trywialny, gdyż jedynie zmienia położenie punktu równowagi. Celem niniejszej pracy jest jednak przedyskutowanie dynamiki w dowolnie obracającej się pułapce i w tym przypadku (jak zostanie pokazane w tym rozdziale) uwzględnienie sił grawitacji prowadzi do zupełnie nowych zjawisk ([1]).

1 Dlaczego grawitacja jest ważna?

Wydaje się w pierwszym odruchu, że stałe pole grawitacyjne nie powinno mieć znaczącego wpływu na dynamikę w pułapce harmoniczej. Jednak należy zauważyć, że jeśli potencjał obraca się wokół osi nierównoległej do kierunku pola grawitacyjnego, to w układzie obracającym się siła grawitacji będzie „widziana” przez cząstkę jako obracająca się siła wymuszająca. Z prostego kursu mechaniki wiemy natomiast (patrz np. [5]), że wszędzie gdzie pojawia się cykliczna siła wymuszająca przy pewnych warunkach może zajść zjawisko rezonansu. W tym przypadku również możemy mieć do czynienia z takim efektem.

2 Wirowanie pola grawitacyjnego w układzie obracającym się

Jak było wspomniane już wcześniej (Rozdział 2. punkt 1.1.) w układzie nieinercyjnym obracającym się inaczej ewoluują wielkości wektorowe - zgodnie ze wzorem (2.2). Aby wyznaczyć ewolucję wektora przyspieszenia grawitacyjnego w układzie obracającej się pułapki wprowadźmy

następującą bazę ortogonalnych wektorów:

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{G}), \quad (3.1a)$$

$$\mathbf{e}_2 = \mathbf{G} - \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{G}), \quad (3.1b)$$

$$\mathbf{e}_3 = \mathbf{n} \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{n} \times \mathbf{G}. \quad (3.1c)$$

gdzie wektor \mathbf{n} jest jak zawsze wektorem jednostkowym w kierunku osi obrotu, a $\mathbf{G} = \mathbf{g}(0)$ wektorem przyspieszenia grawitacyjnego w pewnej ustalonej chwili czasu. Podkreślmy, że jest to baza, która nie zmienia się w czasie w układzie obracającym się. Oczywiście wektor przyspieszenia grawitacyjnego w dowolnej chwili czasu można rozłożyć w tej bazie:

$$\mathbf{g}(t) = g_1(t)\mathbf{e}_1 + g_2(t)\mathbf{e}_2 + g_3(t)\mathbf{e}_3, \quad (3.2)$$

a parametry g_1, g_2 i g_3 muszą spełniać warunki początkowe

$$g_1(0) = g_2(0) = 1, \quad g_3(0) = 0. \quad (3.3)$$

Z jednej strony ewolucja wektora \mathbf{g} opisana jest przez ewoluujące parametry:

$$\dot{\mathbf{g}}(t) = \dot{g}_1(t)\mathbf{e}_1 + \dot{g}_2(t)\mathbf{e}_2 + \dot{g}_3(t)\mathbf{e}_3. \quad (3.4)$$

Z drugiej strony, zważywszy na fakt, że \mathbf{g} jest wielkością wektorową, musi spełniać równanie (2.2). Zatem mamy:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{g}}(t) &= -\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{g}(t) = \\ &= -\boldsymbol{\Omega} (g_1\mathbf{n} \times \mathbf{e}_1 + g_2\mathbf{n} \times \mathbf{e}_2 + g_3\mathbf{n} \times \mathbf{e}_3) \\ &= \boldsymbol{\Omega} (-g_2\mathbf{e}_3 + g_3\mathbf{e}_2). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Porównując wyrażenia (3.4) i (3.5) otrzymujemy wzory na ewolucję współczynników rozkładu w naszej umownej bazie:

$$\dot{g}_1 = 0, \quad (3.6a)$$

$$\dot{g}_2 = \Omega g_3, \quad (3.6b)$$

$$\dot{g}_3 = -\Omega g_2. \quad (3.6c)$$

Równania te, po uwzględnieniu warunków początkowych (3.3) mają następujące rozwiązanie:

$$g_1(t) = 1, \quad g_2(t) = \cos(\Omega t), \quad g_3(t) = -\sin(\Omega t). \quad (3.7)$$

Tym samym, wprowadzając naturalne oznaczenia: $\mathbf{g}_{\parallel} = \mathbf{e}_1$ na część równoległą do wektora prędkości kątowej wektora przyspieszenia oraz $\mathbf{g}_{\perp} = \mathbf{e}_2$ na część prostopadłą, otrzymujemy ewolucję wektora przyspieszenia grawitacyjnego w układzie obracającym się:

$$\mathbf{g}(t) = \mathbf{g}_{\parallel} + \mathbf{g}_{\perp} \cos(\Omega t) - \mathbf{n} \times \mathbf{g}_{\perp} \sin(\Omega t). \quad (3.8)$$

Warto zauważyć, że część zależna od czasu znika jeśli tylko obrót pułapki następuje wokół osi wyznaczonej przez wektor przyspieszenia grawitacyjnego¹. W tym właśnie przypadku zjawisko rezonansu nie zachodzi, bo nie ma oscylującej siły wymuszającej. Z tą sytuacją najczęściej mamy do czynienia w eksperymentach.

Dla dalszych celów warto również zauważyć, że wektor przyspieszenia grawitacyjnego $\mathbf{g}(t)$ można zapisać jako część rzeczywistą pewnego wektora zespolonego:

$$\mathbf{g}(t) = \Re \left(\mathbf{g}_{\parallel} + (\mathbf{g}_{\perp} + i(\mathbf{n} \times \mathbf{g}_{\perp}))e^{i\Omega t} \right). \quad (3.9)$$

3 Równania ruchu i warunki rezonansu

W obecności zewnętrznego pola grawitacyjnego hamiltonian naszego problemu w układzie obracającym się ma postać:

$$\mathcal{H}(t) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{r} \cdot \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} + \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} - m\mathbf{r} \cdot \mathbf{g}(t). \quad (3.10)$$

Hamiltonian ten prowadzi do następujących równań ruchu:

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \frac{\mathbf{p}(t)}{m} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{r}(t), \quad (3.11a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\hat{V} \cdot \mathbf{r} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p}(t) + m\mathbf{g}(t). \quad (3.11b)$$

Równania te można również zapisać w postaci:

$$\frac{d\mathcal{R}(t)}{dt} = \hat{\mathcal{M}}(\Omega) \cdot \mathcal{R}(t) + \Re(\mathcal{G}_{\parallel} + \mathcal{G}_{\perp}e^{i\Omega t}), \quad (3.12)$$

gdzie zostały użyte następujące oznaczenia:

$$\mathcal{R}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix}, \quad (3.13a)$$

$$\hat{\mathcal{M}}(\Omega) = \begin{pmatrix} -\hat{\Omega} & \frac{1}{m}\hat{I} \\ -m\hat{V} & -\hat{\Omega} \end{pmatrix}, \quad (3.13b)$$

$$\mathcal{G}_{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 \\ m\mathbf{g}_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (3.13c)$$

$$\mathcal{G}_{\perp} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{g}_{\perp} + i(\mathbf{n} \times \mathbf{g}_{\perp}) \end{pmatrix}. \quad (3.13d)$$

Rozwiązanie równania (3.12) jest częścią rzeczywistą rozwiązania następującego zespolonego równania różniczkowego:

$$\frac{d\mathcal{W}(t)}{dt} = \hat{\mathcal{M}}(\Omega) \cdot \mathcal{W}(t) + \mathcal{G}_{\parallel} + \mathcal{G}_{\perp}e^{i\Omega t}. \quad (3.14)$$

¹Podkreślmy, że pułapka może być dowolnie zorientowana względem tej osi, tzn. oś ta nie musi być osią własną pułapki.

Z matematycznego punktu widzenia jest to równanie liniowe niejednorodne, zatem sposób jego rozwiązywania jest jasny - należy rozwiązać równanie jednorodne i następnie metodą „uzmianienia stałej” otrzymać rozwiązanie równania niejednorodnego. Można jednak na tą procedurę spojrzeć z punktu widzenia fizyki i odpowiednio zinterpretować kolejne kroki, jak również otrzymany wynik. W tym celu założymy na początek, że znamy już rozwiązanie zagadnienia własnego dla macierzy $\hat{\mathcal{M}}(\Omega)$ - dokładna analiza znajduje się w punkcie 4 rozdziału 2. Tym samym przyjmujemy, że znamy sześć wektorów spełniających warunek²:

$$\hat{\mathcal{M}}(\Omega) \cdot \mathcal{X}_k = i \omega_k(\Omega) \mathcal{X}_k, \quad \forall k=1\dots 6 \quad (3.15)$$

Powszechnie znane twierdzenie matematyczne mówi, że wektory własne każdej macierzy (ew. uzupełnione o bazę jej jądra) są liniowo niezależne i stanowią zupełną bazę w przestrzeni, w której działa dana macierz. Zatem wektory \mathcal{X}_k , wcześniej zwane modami własnymi, stanowią zupełną bazę w naszej przestrzeni i w związku z tym w tej bazie musi dać się przedstawić wektor przyspieszenia ziemskiego $\mathcal{G}(t)$, tzn. istnieją takie współczynniki γ_{\parallel}^k i γ_{\perp}^k , że:

$$\mathcal{G}_{\parallel} = \sum_{k=1}^6 \gamma_{\parallel}^k \mathcal{X}_k, \quad (3.16a)$$

$$\mathcal{G}_{\perp} = \sum_{k=1}^6 \gamma_{\perp}^k \mathcal{X}_k. \quad (3.16b)$$

Również rozwiązanie naszego równania, w każdej chwili czasu można rozłożyć w tej bazie:

$$\mathcal{W}(t) = \sum_{k=1}^6 A^k(t) \mathcal{X}_k$$

lub wprowadzając inne zmienne $\alpha^k(t) = A^k(t)e^{-i\omega_k(\Omega)t}$ rozkład ma postać:

$$\mathcal{W}(t) = \sum_{k=1}^6 \alpha^k(t) e^{i\omega_k(\Omega)t} \mathcal{X}_k. \quad (3.17)$$

Rozkład ten jest o tyle pożyteczny, że w tej sytuacji równanie (3.14) ma postać:

$$\sum_{k=1}^6 \left(i\omega_k(\Omega) \alpha^k + \dot{\alpha}^k \right) e^{i\omega_k(\Omega)t} \mathcal{X}_k = \sum_{k=1}^6 \left(i\omega_k(\Omega) \alpha^k e^{i\omega_k(\Omega)t} + \gamma_{\parallel}^k + \gamma_{\perp}^k e^{i\Omega t} \right) \mathcal{X}_k. \quad (3.18)$$

Ponieważ jednak wektory \mathcal{X}_k są liniowo niezależne to równanie to jest równoważne niezależnym równaniom na współczynniki α^k :

$$\frac{d\alpha^k}{dt} = \gamma_{\parallel}^k e^{-i\omega_k(\Omega)t} + \gamma_{\perp}^k e^{i(\Omega - \omega_k(\Omega))t}, \quad \forall k=1\dots 6 \quad (3.19)$$

²Nawet jeśli macierz jest zdegenerowana, to można podać takie wektory - wtedy część z nich będzie stanowiła liniowo niezależną bazę rozpinającą jądro macierzy $\hat{\mathcal{M}}(\Omega)$.

Podkreślmy, że rozłożyliśmy nasze rozwiązanie w bazie modów własnych, zatem współczynniki $\alpha^k(t)$ mają jasną interpretację fizyczną - amplitudy danego modu w danej chwili czasu. Z równania (3.19) wynika, że w ogólności amplituda danego modu $\alpha^k(t)$ ma charakter oscylacyjny. Jednak jeśli zdarzyłoby się tak, że częstość danego modu własnego ω_k jest równa częstości obrotu pułapki Ω , to będziemy mieli do czynienia z narastającą liniowo w czasie amplitudą danego modu α^k - zajdzie zjawisko *rezonansu*. Jest to warunek konieczny, ale nie wystarczający, bowiem gdyby wektor \mathcal{G}_\perp nie miał w swoim rozkładzie k-tego wektora własnego (tzn. $\gamma_\perp^k = 0$) to w równaniu (3.19) nie wystąpi ostatni człon i tym samym rezonansu nie będzie.

Warto zauważyć, że również w punktach o podwyższonej symetrii (dyskutowanych w punkcie 5.2 rozdziału 2), dla których $\omega_k = 0$ pierwszy człon równania (3.19) traci swój oscylacyjny charakter. Jeśli zatem tylko \mathcal{G}_\parallel ma w swoim rozkładzie mod odpowiadający tej częstości to on będzie sprzęgał się z grawitacją rezonansowo. Tym razem sam mod ma już jednak narastającą liniowo w czasie amplitudę i rezonans grawitacyjny będzie jedynie zwiększał tempo tego narastania, ale sam charakter dynamiki tego modu się nie zmienia.

Rozkład rozwiązania oraz przyspieszenia grawitacyjnego w bazie modów własnych umożliwił nam łatwą interpretację zjawiska rezonansu i pozwolił wyznaczyć warunek jaki musi być spełniony, aby rezonans zachodził. Należy teraz sprawdzić czy te warunki można spełnić w realnej sytuacji.

4 Poszukiwania rezonansu

Z przeprowadzonej powyżej analizy wynika, że warunkiem koniecznym zajścia zjawiska rezonansu jest równość częstości własnej pewnego modu i prędkości obrotu pułapki $\Omega = \omega_i(\Omega)$. Należy zatem rozwiązać równanie charakterystyczne (2.29) ze względu na prędkość obrotu pułapki, w którym położy się $\chi = \Omega^2$. Po wykonaniu tego podstawienia okazuje się, że równanie to redukuje się (patrz [1]) do równania dwukwadratowego postaci:

$$D\Omega^4 + E\Omega^2 + F = 0, \quad (3.20)$$

gdzie:

$$\begin{aligned} D &= -2 \left[\text{Tr}(\hat{V}) - \mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} \right], \\ E &= \frac{\text{Tr}(\hat{V})^2 - \text{Tr}(\hat{V}^2)}{2} + \text{Tr}(\hat{V})\mathbf{n} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \hat{V}^2 \cdot \mathbf{n}, \\ F &= -\text{Det}(\hat{V}). \end{aligned}$$

Równanie to ma rozwiązanie (i tym samym rezonans grawitacyjny może mieć miejsce) jeśli jego wyróżnik Δ_G jest nieujemny. Okazuje się, że dla dowolnej pułapki i dowolnego kierunku obrotu tak jest. Istotnie, wypisując bowiem ten wyróżnik w układzie, w którym macierz potencjału jest diagonalna i spełnia $V_x \leq V_y \leq V_z$ mamy:

$$\begin{aligned} \Delta_G &= E^2 - 4DF = \\ &= \left[(1 - n_x^2/2)V_y V_z - (1 + n_y^2)V_x V_z - (1 + n_z^2/2)V_x V_y \right]^2 + \\ &+ 4V_x \left[n_z^2(V_z - V_x)(V_y V_z + V_y^2/2) + n_y^2(V_y - V_x)(V_y V_z + V_z^2/2) \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Widać zatem, że jest on sumą dwóch nieujemnych wyrażeń i tym samym równanie (3.20) ma zawsze rozwiązania rzeczywiste, czyli sytuacja rezonansowa może mieć miejsce dla dowolnej pułapki.

Rozwiązań równania (3.20) można również szukać graficznie podobnie jak to robiłem z częstościami własnymi, które są rozwiązaniami równania (2.29). Częstości rezonansowe są bowiem zadane warunkiem $\Omega^2 = \chi$. Zatem jeśli na wykresy przedstawiające częstości własne układu zostanie dodatkowo naniesiona krzywa zadana warunkiem $\Omega^2 - \chi = 0$, to miejsca przecięcia tych krzywych będą zadawały częstości własne (Rys. 3.1-3.3).

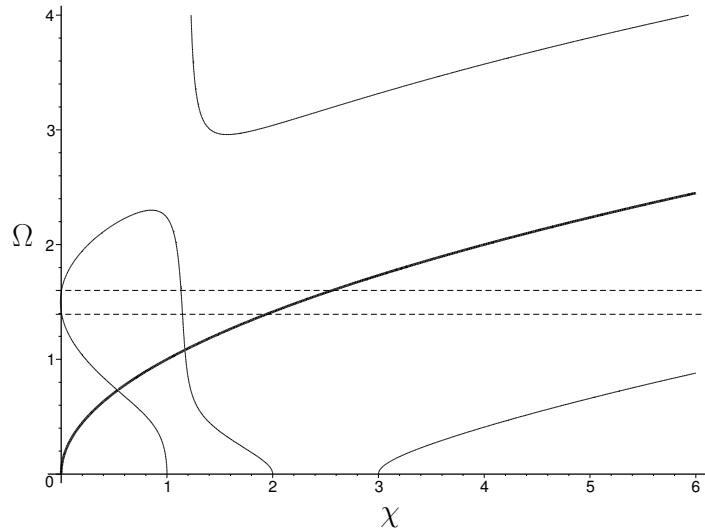
Postać wyróżnika (3.21) pozwala nam również łatwo sprawdzić kiedy istnieje tylko jedno rozwiązanie rzeczywiste (wyróżnik musi być równy zero). W tym celu zauważmy, że drugi człon wyróżnika (3.21) można wyzerować w dwóch przypadkach: pułapka jest częściowo symetryczna lub obrót następuje wokół osi głównej pułapki n_x . Łatwo sprawdzić, że pierwszy przypadek jest nieinteresujący, gdyż nie daje możliwości wyzerowania pierwszego członu. Natomiast w przypadku drugim jeśli tylko spełniony jest warunek:

$$\frac{1}{V_x} = 2 \left(\frac{1}{V_y} + \frac{1}{V_z} \right), \quad n_x = 1 \quad (3.22)$$

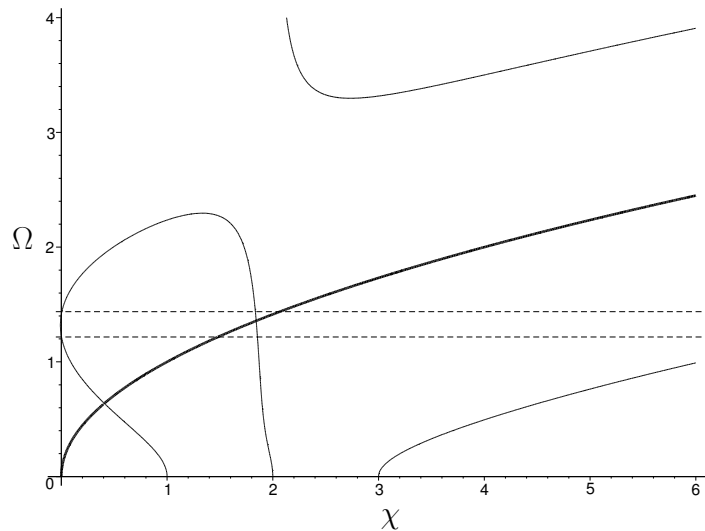
to wyróżnik znika i istnieje tylko jedna częstość rezonansowa (Rys. 3.4).

5 Symulacja dynamiki z polem grawitacyjnym

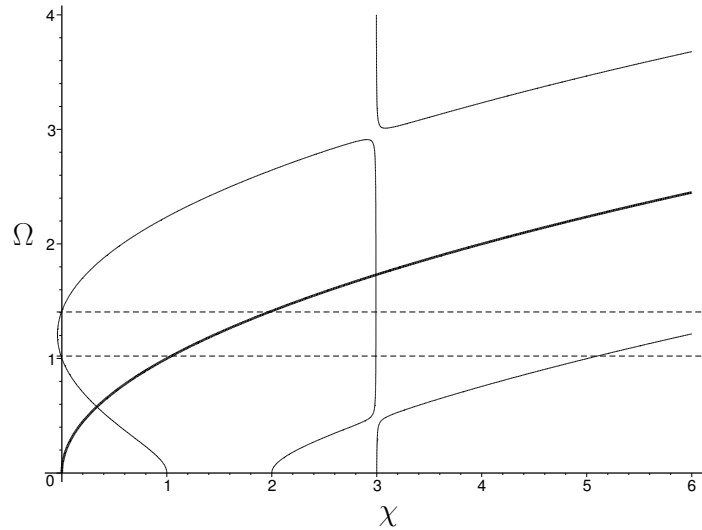
Pełne potwierdzenie istnienia rezonansu grawitacyjnego daje symulacja dynamiki pod wpływem pola grawitacyjnego. Tak jak można było się spodziewać w ogólności pole grawitacyjne zmienia położenie punktu równowagi i amplitudę drgań, a w szczególnym przypadku (obrotu z częstością rezonansową) prowadzi do niestabilnego ruchu i ucieczki cząstki z pułapki (rys. 3.5).



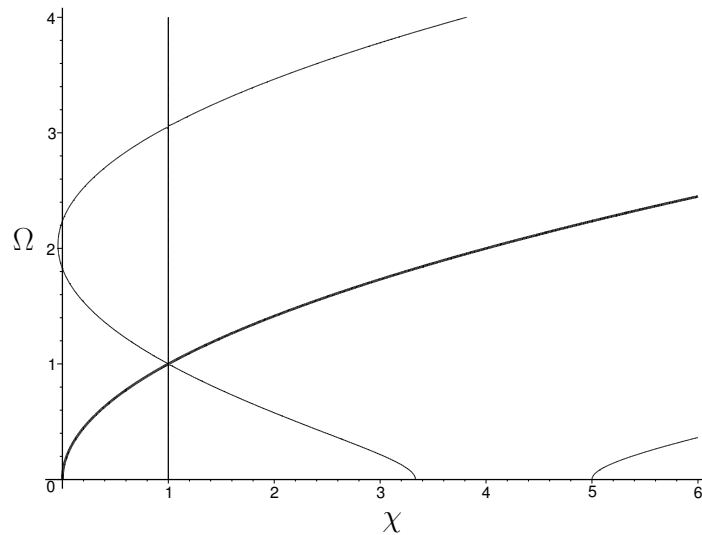
Rysunek 3.1: Krzywa zadana przez wielomian charakterystyczny (2.29) dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 2$ i $V_z = 3$ oraz kierunku obrotu zadany przez wektor jednostkowy $n_x = \sin(\frac{2\pi}{5})$, $n_y = 0$, $n_z = \cos(\frac{2\pi}{5})$. Linie przerywane ograniczają pierwszy obszar niestabilności. Dodatkowo naniesiona jest krzywa rezonansowa $\Omega^2 - \chi = 0$ (linia pogrubiona). Punkty przecięcia definiują częstotliwości rezonansowe. W tym przypadku obie częstotliwości rezonansowe leżą w pierwszym obszarze stabilności.



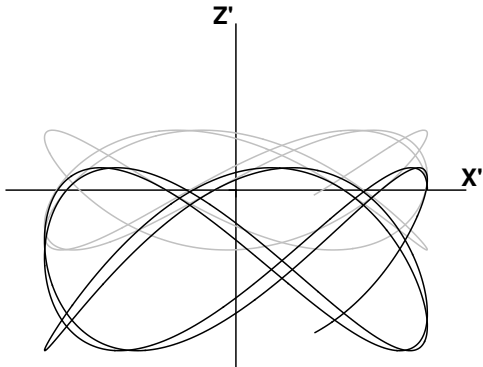
Rysunek 3.2: Ta sama pułapka co na rysunku 3.1. Tym razem obrót następuje wokół osi $n_x = \sin(\frac{\pi}{4})$, $n_y = 0$, $n_z = \cos(\frac{\pi}{4})$. Tym razem druga częstotliwość rezonansowa leży w pierwszym obszarze niestabilności.



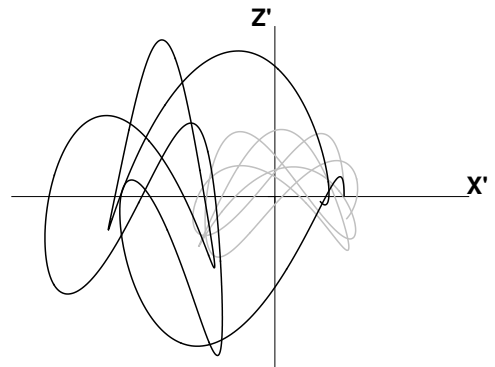
Rysunek 3.3: Ta sama pułapka co na rysunku 3.1. Tym razem obrót następuje wokół osi $n_x = \sin(\frac{\pi}{60})$, $n_y = 0$, $n_z = \cos(\frac{\pi}{60})$. Niższa częstość rezonansowa leży w pierwszym, a wyższa w drugim obszarze stabilności.



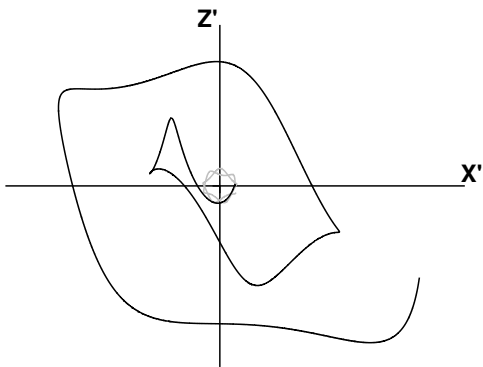
Rysunek 3.4: Graficzne poszukiwanie częstości rezonansowych dla pułapki $V_x = 1$, $V_y = 10/3$, $V_z = 5$ oraz kierunku obrotu $n_x = 1$, $n_y = n_z = 0$. Takie parametry spełniają warunek (3.22) i dlatego istnieje tylko jedna częstość rezonansowa.



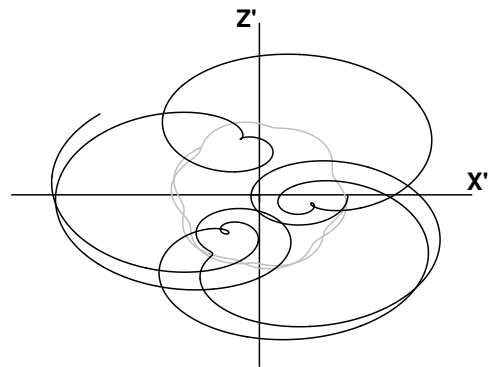
(a) Brak obrotu. Siła grawitacji przesunęła położenie równowagi i zmieniła amplitudę drgań.



(b) ($\Omega = 0,15$) Powolny obrót w pierwszym obszarze stabilności.



(c) ($\Omega = \sqrt{\frac{3}{8}}$) Rezonansowy wpływ siły grawitacji na dynamikę.



(d) ($\Omega = 2$) Szybki obrót w drugim obszarze stabilności.

Rysunek 3.5: Wpływ siły grawitacji na dynamikę cząstki w obracającej się pułapce. Pułapka obraca się wokół swojej osi głównej y . Parametry pułapki $V_x = 1$, $V_z = 3$. Warunki początkowe $x(0) = 1$, $z(0) = y(0) = 0$, $\dot{x}(0) = \dot{y}(0) = 0$, $\dot{z}(0) = 1$. Linia siwa prezentuje trajektorię bez uwzględnienia pola grawitacyjnego. Linia czarna to trajektoria cząstki zakreślona w tym samym czasie w obecności pola grawitacyjnego, którego przyśpieszenie w przyjętych jednostkach wynosi $g = 2$. Na rys. (c) widać jak siła grawitacji rezonansowo destabilizuje dynamikę cząstki.

Rozdział 4

Klasa układów liniowych

W dotychczasowej analizie dyskutowałem dynamikę w obracającym się potencjale harmonicznym. Jest to szczególny przypadek układu liniowego, tzn. takiego, dla którego równania ruchu są różniczkowymi równaniami liniowymi. Gdy do analizy zostało dodane stałe pole grawitacyjne układ nadal pozostał liniowy - jedynie pojawiła się niejednorodność w równaniach ruchu. W niniejszym rozdziale pokażę, że każdy układ liniowy daje się sprowadzić do opisanych już sytuacji za pomocą odpowiednich transformacji kanonicznych.

Całe uogólnienie rozważanego problemu na wszelkie układy liniowe będzie miało kluczowe znaczenie w następnym rozdziale, gdzie przedstawię bezpośredni związek klasycznych układów liniowych z dynamiką kwantowej paczki gaussowskiej i podam przepis na konstrukcję wszystkich kwantowych stanów stacjonarnych dla danego układu liniowego.

1 Hamiltonian układu liniowego

Ponieważ kanoniczne równania ruchu Hamiltona powstają przez jednokrotne różniczkowanie hamiltonianu, to układy liniowe są opisane takimi hamiltonianami, które są maksymalnie kwadratowe w pędach i położeniach. Najogólniejszy taki hamiltonian w dowolnej skończonej liczbie wymiarów dla zmiennych kanonicznych $\boldsymbol{\rho}$ i $\boldsymbol{\pi}$ jest postaci:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \boldsymbol{\pi} \cdot \hat{F} \cdot \boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\rho} \cdot \hat{Q} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{m}{2} \boldsymbol{\rho} \cdot \hat{G} \cdot \boldsymbol{\rho} + m \mathbf{f}(t) \cdot \boldsymbol{\rho} + \frac{1}{m} \mathbf{h}(t) \cdot \boldsymbol{\pi}, \quad (4.1)$$

gdzie macierze \hat{F} oraz \hat{G} są symetryczne, a wektory $\mathbf{f}(t)$ i $\mathbf{h}(t)$ odpowiadają za ewentualne niejednorodności w równaniach ruchu. Aby taki hamiltonian mógł opisywać układ fizyczny należy założyć dodatkowo, że macierz \hat{F} jest dodatnio określona, gdyż tylko wtedy wyraz $\boldsymbol{\pi} \cdot \hat{F} \cdot \boldsymbol{\pi}$ będzie pełnił rolę członu kinetycznego (energia kinetyczna powinna rosnąć z pędem cząstki).

1.1 Diagonalizacja formy pędów

Zauważmy, że istnieje taka nieosobliwa macierz \hat{O} , która spełnia następujący warunek:

$$\hat{O}^T \cdot \hat{F} \cdot \hat{O} = \hat{I}. \quad (4.2)$$

Jest tak dlatego, że macierz \hat{T} jest symetryczna i dodatnio określona¹. Wykonajmy zatem następującą transformację kanoniczną do nowych zmiennych $(\boldsymbol{\rho}', \boldsymbol{\pi}')$:

$$\boldsymbol{\pi}' = \hat{O}^{-1} \cdot \boldsymbol{\pi}, \quad (4.3a)$$

$$\boldsymbol{\rho}' = \hat{O}^T \cdot \boldsymbol{\rho}. \quad (4.3b)$$

Jest to w istocie transformacja kanoniczna, gdyż mamy następujące nawiasy Poissona:

$$\{\rho'_i, \pi'_j\} = O_{ki} O_{jl}^{-1} \{\rho_k, \pi_l\} = O_{ki} O_{jk}^{-1} = \delta_{ij}, \quad (4.4a)$$

$$\{\rho'_i, \rho'_j\} = 0, \quad (4.4b)$$

$$\{\pi'_i, \pi'_j\} = 0. \quad (4.4c)$$

Hamiltonian (4.1) w nowych zmiennych kanonicznych ma postać:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \boldsymbol{\pi}'^2 + \boldsymbol{\rho}' \cdot \hat{W} \cdot \boldsymbol{\pi}' + \frac{m}{2} \boldsymbol{\rho}' \cdot \hat{U} \cdot \boldsymbol{\rho}' + m \mathbf{f}'(t) \cdot \boldsymbol{\rho}' + \frac{1}{m} \mathbf{h}'(t) \cdot \boldsymbol{\pi}', \quad (4.5)$$

gdzie:

$$\hat{W} = \hat{O}^{-1} \cdot \hat{Q} \cdot \hat{O}, \quad (4.6a)$$

$$\hat{U} = \hat{O}^{-1} \cdot \hat{G} \cdot (\hat{O}^T)^{-1}, \quad (4.6b)$$

$$\mathbf{f}'(t) = \hat{O} \cdot \mathbf{f}(t), \quad (4.6c)$$

$$\mathbf{h}'(t) = (\hat{O}^T)^{-1} \cdot \mathbf{h}(t). \quad (4.6d)$$

1.2 Uproszczenie niejednorodności

Prostą transformacją kanoniczną można usunąć z hamiltonianu (4.5) jedną z niejednorodności. Transformacja taka polega na przesunięciu o stały wektor jednej ze zmiennych kanonicznych i ma postać (nowe zmienne kanoniczne to (\mathbf{R}, \mathbf{P})):

$$\mathbf{R} = \boldsymbol{\rho}', \quad \mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}' + \mathbf{h}'(t). \quad (4.7)$$

Hamiltonian w nowych zmiennych kanonicznych upraszcza się do postaci:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + \mathbf{R} \cdot \hat{W} \cdot \mathbf{P} + \frac{m}{2} \mathbf{R} \cdot \hat{U} \cdot \mathbf{R} - m \left(\frac{1}{m} \hat{W} \cdot \mathbf{h}'(t) - \mathbf{f}'(t) \right) \cdot \mathbf{R} - \frac{\mathbf{h}'^2}{2m}. \quad (4.8)$$

Wprowadzając upraszczające oznaczenie na występujący tu wektor niejednorodności:

$$\mathbf{g}(t) = \frac{1}{m} \hat{W} \cdot \mathbf{h}'(t) - \mathbf{f}'(t) \quad (4.9)$$

¹dodatnio określoność formy jest tutaj kluczowa. Jak wynika bowiem z twierdzenia o bezwładności Sylwestera dla form kwadratowych taka transformacja nie może zmienić sygnatury formy.

oraz odrzucając zależącą jedynie od czasu wielkość $\mathbf{h}'^2/2m$, która nie ma żadnego fizycznego znaczenia (nie zmienia ona kanonicznych równań ruchu) otrzymujemy prosty hamiltonian naszego układu:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{P}^2 + \mathbf{R}\cdot\hat{W}\cdot\mathbf{P} + \frac{m}{2}\mathbf{R}\cdot\hat{U}\cdot\mathbf{R} - m\mathbf{g}(t)\cdot\mathbf{R}. \quad (4.10)$$

Warto podkreślić w tym miejscu, że w ogólności nie można podać takiej transformacji, która usuwałaby jednocześnie obie niejednorodności. Jest tak dlatego, że w ogólnym problemie macierz członu mieszanego \hat{W} przy usuwaniu jednej niejednorodności produkuje drugą.

1.3 Antysymetryzacja członu mieszanego

Ostatnim krokiem w uproszczeniu hamiltonianu (4.1) jest usunięcie symetrycznej części członu mieszanego. Wprowadźmy w tym celu następujące oznaczenia na część symetryczną i antysymetryczną macierzy \hat{W} :

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{W} + \hat{W}^T), \quad (4.11a)$$

$$\hat{\Omega} = \frac{1}{2}(\hat{W} - \hat{W}^T). \quad (4.11b)$$

Wykonajmy następującą transformację kanoniczną do zmiennych (\mathbf{r}, \mathbf{p}) :

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}, \quad (4.12a)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{P} + m\hat{S}\cdot\mathbf{R}. \quad (4.12b)$$

Jest to faktycznie transformacja kanoniczna, gdyż mamy spełnione następujące nawiasy Poissona:

$$\{r_i, p_j\} = \{R_i, P_j\} + mS_{jk}\{R_i, R_k\} = \delta_{ij}, \quad (4.13a)$$

$$\{r_i, r_j\} = \{R_i, R_j\} = 0, \quad (4.13b)$$

$$\begin{aligned} \{p_i, p_j\} &= \{P_i, P_j\} + m^2 S_{ik} S_{jl} \{R_k, R_l\} \\ &\quad - m S_{ik} \{R_k, P_j\} - m S_{jl} \{P_i, R_l\} = \\ &= -m(S_{ik}\delta_{kj} - S_{jl}\delta_{il}) = \\ &= -mS_{ij} + mS_{ji} = 0. \end{aligned} \quad (4.13c)$$

Zauważmy, że spełnienie ostatniego warunku na transformację kanoniczną (4.13c) było możliwe jedynie dlatego, że macierz \hat{S} jest symetryczna. Tym samym widzimy, że w ogólności nie można wykonać transformacji z całą macierzą \hat{W} .

Hamiltonian w nowych zmiennych kanonicznych ma postać:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{r}\cdot\hat{\Omega}\cdot\mathbf{p} + \frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot(\hat{U} - \hat{S}^2 - 2\hat{\Omega}\cdot\hat{S})\cdot\mathbf{r} - m\mathbf{g}(t)\cdot\mathbf{r}. \quad (4.14)$$

Jak widać transformacja (4.12) usunęła część symetryczną członu mieszanego i zmieniła odpowiednio formę kwadratową w położeniach. Ze względu na już opisaną subtelną zależność

(4.13c) taką transformacją nie można usunąć w ogólności całego członu mieszanego. Wprowadzając oznaczenie²:

$$\hat{V} = \hat{U} - \hat{S}^2 - [\hat{\Omega}, \hat{S}], \quad (4.15)$$

otrzymujemy następujący hamiltonian naszego układu:

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{r} \cdot \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} + \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} - m\mathbf{g}(t) \cdot \mathbf{r}. \quad (4.16)$$

Hamiltonian ten formalnie wygląda tak samo jak hamiltonian (3.10) opisujący ruch w obracającym się potencjale harmonicznym z jednorodnym, zewnętrznym polem grawitacyjnym. W tym przypadku jednak hamiltonian ten opisuje dynamikę n wymiarowego dowolnego układu liniowego. Macierz \hat{V} w ogólnym przypadku nie jest dodatnio określona (co wynika z (4.15)), a wektor $\mathbf{g}(t)$ jednorodnego pola potencjalnego siły zewnętrznej może w dowolny sposób zależeć od czasu.

Kanoniczne równania ruchu dla cząstki opisanej takim hamiltonianem mają postać:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{r}, \quad (4.17a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -m\hat{V} \cdot \mathbf{r} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{p} + m\mathbf{g}(t). \quad (4.17b)$$

Udało się zatem wykazać, że dowolny układ liniowy (tzn. opisany hamiltonianem postaci (4.1)) może zostać sprowadzony za pomocą prostych transformacji kanonicznych do układu obracającego się potencjału harmonicznego (przyciągającego lub odpychającego) w zewnętrznym, jednorodnym, dowolnie zależnym od czasu polu siły.

2 Zagadnienie własne dla jednorodnego układu liniowego

Ważną cechą każdego układu liniowego są jego częstości i mody własne. Aby je znaleźć rozważamy oczywiście układ jednorodny z usuniętym wyrazem $m\mathbf{g}(t)$ z równania (4.17b).

Modem własnym o częstości ω jednorodnego układu liniowego nazywamy rozwiązanie postaci:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 e^{i\omega t}, \quad (4.18a)$$

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_0 e^{i\omega t}. \quad (4.18b)$$

Aby mod taki był rzeczywiście rozwiązaniem dynamicznych równań ruchu (4.17) bez niejednorodności amplituda tego modu musi spełniać równanie:

$$\begin{pmatrix} -\hat{\Omega} - i\omega & \frac{1}{m} \\ -m\hat{V} & -\hat{\Omega} - i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_0 \\ \mathbf{p}_0 \end{pmatrix} = 0. \quad (4.19)$$

²Ze względu na to, że iloczyn macierzy $2\hat{\Omega} \cdot \hat{S}$ stoi pomiędzy dwoma położeniami istotna jest jedynie jego część symetryczna, która jest równa komutatorowi tych macierzy $[\hat{\Omega}, \hat{S}]$.

Aby istniało nietrywialne rozwiązanie tego układu równania częstość własna modu ω musi być miejscem zerowym wyznacznika występującej tu macierzy czyli musi być zerem wielomianu charakterystycznego. Ponieważ rozpatrywany przez nas układ jest n wymiarowy to równanie charakterystyczne jest wielomianem stopnia $2n$ w częstości własnej ω .

W dodatku C podane jest twierdzenie matematyczne i jego dowód, że w wielomianie charakterystycznym występującej tu macierzy nie występują wyrazy z nieparzystymi potęgami ω co znaczy, że równanie to sprowadza się do równania stopnia n na kwadraty częstości własnych. Płynie stąd bardzo ważny fakt fizyczny: *niezależnie od własności danego układu liniowego ani od ilości jego stopni swobody częstości i mody własne zawsze są podzielone na pary*. Jeśli układ ma mod o częstości ω to ma również mod o częstości $-\omega$.

Ten fakt będzie miał duże znaczenie przy konstruowaniu funkcji falowych układu liniowego w następnym rozdziale.

Rozdział 5

Funkcje falowe układów liniowych

Rozważany przeze mnie problem obracającego się potencjału harmonicznego (lub ogólniej dowolnego układu liniowego) jest oczywiście problemem nierelatywistycznym. Zatem pełny opis dynamiki kwantowej może być zrealizowany w języku funkcji falowej pojedynczej cząstki, która spełnia równanie Schrödingera. Ponieważ w poprzednim rozdziale wykazałem kanoniczną równoważność dowolnego układu liniowego z układem obracającego się potencjału harmonicznego w zewnętrznym jednorodnym polu siły, punktem wyjścia do rozważań kwantowych może być hamiltonian (4.16)¹, w którym oczywiście należy zastąpić położenia i pędy przez kwantowe operatory tych obserwabli. Funkcja falowa w reprezentacji położeniowej $\Psi(\mathbf{r}, t)$ powinna zatem spełniać następujące równanie Schrödingera:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{\hbar}{i}\mathbf{r}\cdot\hat{\Omega}\cdot\nabla + \frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r} - m\mathbf{g}(t)\cdot\mathbf{r} \right) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.1)$$

Podkreślmy jeszcze raz, że jest to równanie Schrödingera opisujące n -wymiarowy układ liniowy i występujące w nim macierze $\hat{\Omega}$ i \hat{V} są kwadratowymi macierzami $n \times n$. Dodatkowo macierze te są odpowiednio antysymetryczna i symetryczna. Operator różniczkowania ∇ ma n składowych, tzn. we współrzędnych kartezjańskich ma postać: $\nabla = \sum_{i=1}^n e^i \partial_i$.

W niniejszym rozdziale pokaże, w języku funkcji falowej, jaki jest ścisły związek dynamiki kwantowej opisanej równaniem (5.1) z klasycznym układem liniowym opisany hamiltonianem (4.16). Okaze się, że dynamikę paczki gaussowskiej można całkowicie zrozumieć znając jedynie klasyczne rozwiązania równań ruchu (4.17). Również skonstruowanie z klasycznych rozwiązań dowolnego stanu stacjonarnego jest możliwe bez potrzeby diagonalizowania kwantowego hamiltonianu. W ostatnim kroku podam przepis na konstrukcję zupełnego układu funkcji własnych rozważanego problemu.

¹Przy dochodzeniu do tego hamiltonianu została odrzucona zależąca jedynie od czasu wielkość $\epsilon(t) = \hbar'^2/2m$ jako niemierzalna fizycznie. W mechanice falowej może ona zostać usunięta prostą zmianą globalnej fazy funkcji falowej $\Psi \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon(t')} \Psi$, czyli również nie ma fizycznych konsekwencji.

1 Dynamika paczki gaussowskiej

W pierwszym kroku do zrozumienia dynamiki kwantowej przeanalizujemy ewolucję paczki gaussowskiej podyktowanej przez równanie (5.1). Najogólniejsza paczka gaussowska jest postaci:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N(t)e^{i\phi(t)/\hbar} \exp\left(-\frac{m}{2\hbar}(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) \cdot \hat{K}(t) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) + \frac{i}{\hbar}\mathbf{r} \cdot \mathbf{P}(t)\right). \quad (5.2)$$

Część normująca funkcję falową została dla późniejszych celów rozłożona na jej moduł N i część fazową ϕ . Zakładamy, że nasza funkcja falowa jest dobrze unormowana w chwili $t = 0$, tzn.:

$$1 = \int_{\mathbb{R}^n} d^n \mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, 0)|^2 = N(0)^2 \left[\frac{2\pi\hbar}{m \text{Det}(\Re \hat{K}(0))} \right]^{n/2}. \quad (5.3)$$

Oczywiście równanie Schrödingera (5.1) zachowuje normę (patrz np. [7, 6]) i dlatego funkcja falowa podczas swojej ewolucji jest zawsze dobrze unormowana.

Warto zauważyć w tym miejscu, że aby funkcja falowa (5.2) miała rzeczywiście kształt paczki gaussowskiej i była normowalna do jedności, to określająca jej kształt macierz \hat{K} musi mieć dodatnio określoną część rzeczywistą.

Parametry \mathbf{R} i \mathbf{P} funkcji falowej (5.2) mają naturalną interpretację fizyczną. Są one wartościami średnimi kwantowomechanicznych operatorów położenia $\hat{\mathbf{r}}$ i pędu $\hat{\mathbf{p}}$. Mamy bowiem związki:

$$\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} d^n \mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{R}(t), \quad (5.4a)$$

$$\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} d^n \mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{P}(t). \quad (5.4b)$$

1.1 Równania ewolucji

Aby wyznaczyć równania ewolucji dla paczki gaussowskiej (5.2) obliczam najpierw odpowiednie pochodne występujące w równaniu Schrödingera:

$$\begin{aligned} \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = & \left[\frac{\dot{N}}{N} + \frac{i\dot{\phi}}{\hbar} + \frac{m}{\hbar} \dot{\mathbf{R}} \cdot \hat{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \right. \\ & \left. - \frac{m}{2\hbar} (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot \dot{\hat{K}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \dot{\mathbf{P}} \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (5.5a)$$

$$\nabla \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{m}{\hbar} \hat{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.5b)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = & \left[-\frac{m}{\hbar} \text{Tr}(\hat{K}) + \frac{m^2}{\hbar^2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot \hat{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \right. \\ & \left. - \frac{2mi}{\hbar^2} \mathbf{P} \cdot \hat{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) - \frac{\mathbf{P}^2}{\hbar^2} \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (5.5c)$$

Wykorzystując (5.5) równanie Schrödingera można uporządkować i sprowadzić do postaci:

$$\begin{aligned}
0 = & (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot \left[\frac{im}{2} \dot{\hat{K}} - \frac{m}{2} \hat{K}^2 + im\hat{\Omega}\hat{K} + \frac{m}{2}\hat{V} \right] \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \\
& + (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot \hat{K} \cdot \left[-im\dot{\mathbf{R}} - im\hat{\Omega} \cdot \mathbf{R} + i\mathbf{P} \right] + \\
& + \mathbf{r} \cdot \left[\dot{\mathbf{P}} + \hat{\Omega} \cdot \mathbf{P} + m\hat{V} \cdot \mathbf{R} - m\mathbf{g} \right] + \\
& - i\hbar \frac{\dot{N}}{N} + \dot{\phi} + \frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\hat{K}) - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Zatem równanie Schrödingera (5.1) jest całkowicie równoważne następującemu układowi równań opisujących naszą paczkę:

$$\frac{d\hat{K}(t)}{dt} = -i\hat{K}(t)^2 + i\hat{V} - [\hat{\Omega}, \hat{K}(t)], \tag{5.7a}$$

$$\frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} = \frac{\mathbf{P}(t)}{m} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{R}(t), \tag{5.7b}$$

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = -m\hat{V} \cdot \mathbf{R}(t) - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{P}(t) + m\mathbf{g}(t), \tag{5.7c}$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{N(t)}{2} \text{Tr}(\Im\hat{K}(t)), \tag{5.7d}$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\Re\hat{K}(t)) - \frac{\mathbf{P}(t)^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{R}(t) \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}(t). \tag{5.7e}$$

Porównując równania (5.7b) i (5.7c) z klasycznymi równaniami ruchu (4.17) widzimy od razu, że dynamika środka masy paczki gaussowskiej jest całkowicie zgodna z dynamiką klasyczną pojedynczej cząstki. Jest to przejaw znanych z kursu mechaniki kwantowej równań Ehrenfesta (patrz np. [7]), które dla układów liniowych są spełnione dokładnie².

Warto również podkreślić, że dynamika środka masy paczki gaussowskiej całkowicie odseparowała się od pozostałych (kwantowych) stopni swobody. Zmienne opisujące środek masy paczki \mathbf{R} i \mathbf{P} występują jedynie w równaniu na zmianę fazy i nie mają żadnego wpływu na kształt paczki. Jest to również wynik zgodny, z rozumowaniem przedstawionym w rozdziale 2. na temat separacji dynamiki środka masy.

1.2 Ewolucja kształtu paczki

Zajmijmy się teraz bliżej równaniem opisującym dynamikę kształtu paczki falowej (5.7a). Jest to macierzowe równanie różniczkowe, nieliniowe. Jego rozwiązanie może się wydawać bardzo trudne, jeśli w ogóle możliwe. Równania macierzowe postaci naszego równania na kształt paczki są jednak bardzo dobrze przestudiowanymi z matematycznego punktu widzenia równaniami różniczkowymi znanymi pod nazwą *równań Riccatiego* [8, 22, 9]. Istnieje generalna metoda matematyczna rozwiązywania takich równań. Wiedząc jednak, że równanie to opisuje pewien

²Dla układów liniowych mamy bowiem taką własność, że siła uśredniona po pewnym odcinku przestrzeni, jest siłą od średniego położenia, czyli środka tego odcinka.

fizyczny układ postaram się nadać tej metodzie pewną interpretację fizyczną (postępując tak jak było to nakreślone innym problemie w [21]), co jak się później okaże będzie miało kolosalne znaczenie w zrozumieniu pełnej dynamiki kwantowej rozważanego układu.

Pierwszym krokiem prowadzącym do rozwiązania równania (5.7a) wykonujemy podstawienie macierzowe postaci:

$$\hat{K}(t) = -\frac{i}{m}\hat{N}(t)\cdot\hat{D}^{-1}(t). \quad (5.8)$$

Na tym etapie wymagamy, aby macierz \hat{D} nie była osobliwa w dowolnej chwili czasu. Później okaże się, że jeśli macierz \hat{D} nie jest osobliwa w pewnej ustalonej chwili czasu to nie będzie osobliwa również podczas całej swojej ewolucji.

Wykonując to podstawienie równanie (5.7a) sprowadza się do postaci:

$$-\frac{i}{m}\frac{d\hat{N}}{dt}\cdot\hat{D}^{-1} + \frac{i}{m}\hat{N}\cdot\hat{D}^{-1}\frac{d\hat{D}}{dt}\cdot\hat{D}^{-1} = \frac{i}{m^2}\hat{N}\cdot\hat{D}^{-1}\cdot\hat{N}\cdot\hat{D}^{-1} + i\hat{V} + \frac{i}{m}\hat{\Omega}\cdot\hat{N}\cdot\hat{D}^{-1} - \frac{i}{m}\hat{N}\cdot\hat{D}^{-1}\cdot\hat{\Omega}. \quad (5.9)$$

W następnym kroku rozbijamy to równanie na dwa niezależne równania, które muszą spełniać macierze \hat{N} i \hat{D} :

- przyrównując do siebie pierwszy wyraz z lewej strony z drugim i trzecim po prawej stronie oraz mnożąc z prawej strony przez macierz \hat{D} i współczynnik im otrzymujemy:

$$\frac{d\hat{N}}{dt} = -m\hat{V}\cdot\hat{D} - \hat{\Omega}\cdot\hat{N}, \quad (5.10a)$$

- przyrównując do siebie odpowiednie strony złożone z pozostałych wyrazów i mnożąc równanie z prawej strony przez macierz \hat{D} i z lewej strony przez iloczyn macierzy $\hat{D}\cdot\hat{N}^{-1}$ oraz współczynnik $-im$ otrzymujemy:

$$\frac{d\hat{D}}{dt} = \frac{1}{m}\hat{N} - \hat{\Omega}\cdot\hat{D}. \quad (5.10b)$$

Otrzymujemy w ten sposób dwa macierzowe równania różniczkowe *liniowe* na macierze \hat{D} i \hat{N} . Jeśli porównamy te równania z klasycznymi równaniami ruchu (4.17) to zauważymy, że kolumny macierzy \hat{D} i \hat{N} spełniają odpowiednio równania ruchu dla klasycznych położeń i pędów. Cała zatem dynamika kształtu kwantowej paczki gaussowskiej zakodowana jest w klasycznych rozwiązaniach równań ruchu!

Cała opisana tutaj konstrukcja przekształcenia równania Riccatiego w układ równań liniowych może wydawać się na początku oparta na zbyt ostrych założeniach. Nie wiemy bowiem, czy nie istnieją takie rozwiązania równania Riccatiego (4.17), które nie dają się przedstawić w postaci ilorazu dwóch macierzy. W dodatku C przedstawiam ogólny dowód, że rozwiązywanie równania Riccatiego jest całkowicie równoważne rozwiązywaniu układu równań liniowych dla macierzy \hat{N} i \hat{D} i każde rozwiązanie równania (5.7a) daje się przedstawić w postaci (5.8).

Przykład w jednym wymiarze

Zilustrujmy na prostym przykładzie ([19, 20]) jak działa opisany powyżej mechanizm konstruowania ewolucji paczki gaussowskiej przez rozwiązywanie klasycznych równań ruchu. W tym celu rozważmy jednowymiarowy oscylator harmoniczny o częstości ω . Hamiltonian dla takiego układu ma postać:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \quad (5.11)$$

Hamiltonian ten prowadzi do prostych równań ruchu:

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -m\omega^2 x. \quad (5.12)$$

Rozwiązanie tych równań ruchu dla warunku początkowego $x(0) = x_0$, $p(0) = p_0$ ma postać:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t), \quad (5.13a)$$

$$p(t) = p_0 \cos(\omega t) - m\omega x_0 \sin(\omega t). \quad (5.13b)$$

W mechanice kwantowej jednowymiarowy oscylator harmoniczny opisany jest równaniem Schrödingera ([7, 6]):

$$i\hbar\partial_t\Psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + m\omega^2 x^2\right)\Psi(x, t). \quad (5.14)$$

Rozważmy funkcję falową w postaci unormowanej paczki gaussowskiej:

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{\hbar\pi}{m\Re\alpha(t)}\right)^{\frac{1}{4}} e^{i\phi(t)} e^{-\frac{m}{2\hbar}\alpha(t)x^2}. \quad (5.15)$$

Kształt paczki opisuje zmienny w czasie parametr $\alpha(t)$. Zgodnie ze wzorem (5.7e) faza funkcji falowej jest całkowicie zdeterminowana przez ewolucję parametru $\alpha(t)$ i wyraża się wzorem:

$$\phi(t) = -\frac{1}{2} \int_0^t \Re\alpha(\tau) d\tau. \quad (5.16)$$

Załóżmy, że w chwili początkowej paczka falowa jest opisana przez warunek $\alpha(0) = k\omega$, gdzie k jest dowolną stałą bezwymiarową i zbadajmy dalszą ewolucję naszej paczki. Zgodnie z naszymi poprzednimi rozważaniami parametr $\alpha(t)$ spełnia różniczkowe równanie Riccatiego:

$$\dot{\alpha}(t) = -i\alpha^2(t) + i\omega^2. \quad (5.17)$$

Wykonując podstawienie linearyzujące równanie Riccatiego $\alpha(t) = -\frac{i}{m} \frac{n(t)}{d(t)}$ otrzymujemy równania na parametry $d(t)$ i $n(t)$ zgodne z równaniami klasycznymi (5.12)³.

$$\dot{d}(t) = \frac{n(t)}{m}, \quad \dot{n}(t) = -m\omega^2 d(t). \quad (5.18)$$

³Wielkości $d(t)$ i $n(t)$ ewoluują tak samo jak odpowiednio klasyczne położenie i klasyczny pęd.

Mamy pewną dowolność w wyborze warunku początkowego dla wielkości n i d zgodnego z warunkiem początkowym na parametr $\alpha(0)$ - możemy wybrać je z dokładnością do stałej multiplikatywnej, która nie ma oczywiście żadnego znaczenia fizycznego, gdyż uprości się podczas dzielenia. Możemy wybrać warunek początkowy na przykład tak: $d(0) = -i\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $n(0) = k\sqrt{\hbar m\omega}$. Z rozwiązania klasycznego natychmiast odczytujemy rozwiązanie równań (5.18):

$$d(t) = -i\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} [\cos(\omega t) - i k \sin(\omega t)], \quad (5.19a)$$

$$n(t) = \sqrt{\hbar m\omega} [k \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)]. \quad (5.19b)$$

To pozwala nam wypisać całe rozwiązanie równania Schrödingera bez konieczności jego rozwiązywania:

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\Re \frac{\cos(\omega t) - i k \sin(\omega t)}{k \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)}\right)^{\frac{1}{4}} e^{i\phi(t)} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \frac{k \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)}{k \cos(\omega t) - i \sin(\omega t)} x^2\right), \quad (5.20)$$

gdzie fazę $\phi(t)$ można wyliczyć ze wzoru 5.16.

Taka funkcja falowa opisuje dobrze znane z kursu mechaniki kwantowej stany pulsujące zwane w optyce kwantowej stanami ściśniętymi.

Warto w tym miejscu zauważyć, że jeśli w chwili początkowej wybralibyśmy $k = 1$ to cała zależność od czasu pozostanie jedynie w fazie funkcji falowej, która jest niemierzalna (reszta uprości się ze względu na to, że $n(t)$ i $d(t)$ będą wtedy do siebie proporcjonalne). W ten sposób otrzymamy jeden ze stanów stacjonarnych równania Schrödingera (5.14).

2 Gaussowski stan stacjonarny

W przytoczonym przed chwilą przykładzie jednowymiarowy stan pulsujący w szczególnym przypadku przechodził w stan stacjonarny, czyli stan, którego jedyna zależność od czasu jest w zmieniającej się fazie. Przedstawię teraz ogólny przepis na konstrukcję gaussowskiego stanu stacjonarnego w przypadku n -wymiarowego układu liniowego.

2.1 Warunki stacjonarności

Z najogólniejszej postaci gaussowskiej funkcji falowej (5.2) oraz wzorów (5.7) na ewolucję parametrów tej paczki wynika, że aby stan ten był stacjonarny musimy położyć $\mathbf{R}(t) = 0$ oraz $\mathbf{P}(t) = 0$. Jest tak dlatego, że równania na dynamikę środka masy są całkowicie odseparowane od reszty i warunki $\dot{\mathbf{R}}(t) = 0$ i $\dot{\mathbf{P}}(t) = 0$ można spełnić jedynie w ten sposób. Oczywiście wymaga to również, aby nie występowało zależące od czasu zewnętrzne pole jednorodne $\mathbf{g}(t)$ ⁴. Dlatego od tej pory zakładamy, że zewnętrzne pole nie występuje.

Aby nie zmieniał się kształt paczki falowej musi być spełniony warunek:

$$\frac{d}{dt} \Re \hat{K} = 0, \quad (5.21a)$$

⁴Samo pojęcie stanu stacjonarnego jest dobrze zdefiniowane dla hamiltonianów niezależnych od czasu.

gdyż tylko część rzeczywista macierzy \hat{K} ma wpływ na mierzalną ewolucję kształtu. Jednak wzór (5.7a) na ewolucję \hat{K} sprzęga ze sobą część rzeczywistą i urojoną macierzy \hat{K} , a zatem jedynym sposobem na zapewnienie warunku (5.21a) jest spełnienie analogicznego warunku dla całej macierzy:

$$\frac{d}{dt}\hat{K} = 0. \quad (5.21b)$$

Ostatnim warunkiem na stan stacjonarny jest bezśladowość części urojonej macierzy \hat{K} , która wynika ze wzoru (5.7d) ($\dot{N} = 0$). Warunek ten jest jednak automatycznie spełniony jeśli tylko spełniony jest warunek (5.21b), gdyż równanie Schrödingera zachowuje unormowanie funkcji falowej i jeśli kształt paczki się nie zmienia to nie ma możliwości aby ewoluowała wielkość normalizująca funkcję falową $N(t)$.

2.2 Algebraiczne macierzowe równanie Riccatiego

Warunek (5.21b) sprowadza się do problemu znalezienia rozwiązania, tzw. algebraicznego macierzowego równania Riccatiego (patrz [22]):

$$0 = -i\hat{K}_0^2 + i\hat{V} - [\hat{\Omega}, \hat{K}_0]. \quad (5.22)$$

Macierz \hat{K}_0 nie zależy od czasu i opisuje kształt gaussowskiego stanu stacjonarnego.

Łatwo jest sprowadzić to równanie do układu równań liniowych wykonując, tak jak w przypadku zależnego od czasu równania Riccatiego, podstawienie (5.8). Należy bowiem zauważyć, że jeśli uda nam się znaleźć takie dwie macierze $\hat{N}(t)$ i $\hat{D}(t)$, które będą miały postać:

$$\hat{D}(t) = \hat{D}_0 \cdot \hat{E}(t), \quad (5.23a)$$

$$\hat{N}(t) = \hat{N}_0 \cdot \hat{E}(t), \quad (5.23b)$$

gdzie cała zależność od czasu obu macierzy znajduje się w nieosobliwej macierzy $\hat{E}(t)$, to wtedy macierz \hat{K}_0 zdefiniowana zgodnie z (5.8):

$$\hat{K}_0 = -\frac{i}{m}\hat{N}(t) \cdot \hat{D}(t) = -\frac{i}{m}\hat{N}_0 \cdot \hat{E}(t) \cdot \hat{E}^{-1}(t) \cdot \hat{D}_0^{-1} = -\frac{i}{m}\hat{N}_0 \cdot \hat{D}_0^{-1} \quad (5.24)$$

jest niezależna od czasu. Cały zatem problem rozwiązywania równania (5.22) sprowadza się do znalezienia odpowiednich macierzy $\hat{N}(t)$ i $\hat{D}(t)$.

Okazuje się, że znalezienie takich macierzy nie jest trudne. Przypominając sobie bowiem, że kolumny tych macierzy spełniają dokładnie te same równania co klasyczne położenia i pędy od razu zrozumiałe jest, że wybierając jako kolumny klasyczne mody własne problemu (4.18) macierze $\hat{D}(t)$ i $\hat{N}(t)$ będą miały poszukiwaną własność (5.23). Wtedy bowiem macierz $\hat{E}(t)$ jest diagonalną macierzą wykładników typu $e^{i\omega_i t}$, a macierze \hat{D}_0 i \hat{N}_0 mają w i -tej kolumnie odpowiednio amplitudę położenia i pędu modu własnego o częstotliwości ω_i . Zatem problem znalezienia stacjonarnego gaussowskiego rozwiązania równania Schrödingera (5.1) sprowadza się do znalezienia klasycznych modów własnych problemu.

2.3 Wybór modów własnych do konstrukcji \hat{K}_0

Przedstawiony powyżej sposób konstrukcji macierzy \hat{K}_0 opisującej stan stacjonarny nie jest jeszcze kompletny. Należy zauważyć bowiem, że do konstrukcji tej macierzy jest potrzebnych n niezależnych⁵ modów własnych. Jednak rozpatrywany układ klasyczny, z którego modów mamy skorzystać jest n wymiarowy i zatem posiada aż $2n$ modów własnych. Naturalnie pojawia się więc pytanie, które mody własne należy wybrać do konstrukcji macierzy \hat{K}_0 .

Do tej pory nie wykorzystaliśmy jeszcze jednego warunku jaki musi spełniać każda macierz \hat{K} opisująca stan gaussowski. Otóż, aby mógł to być stan gaussowski to część rzeczywista $\Re \hat{K}$ musi być dodatnio określona. Jest to kryterium, które rozstrzyga o wyborze modów własnych potrzebnych do konstrukcji stacjonarnej macierzy \hat{K}_0 - należy wybrać takie mody, aby macierz \hat{K}_0 miała dodatnio określoną część rzeczywistą.

Nie zawsze jednak można takiego wyboru dokonać. Okazuje się bowiem, że jeśli układ opisywany klasycznymi równaniami ruchu jest niestabilny, tzn. przynajmniej jeden z modów własnych ma nierzeczywistą (zespoloną lub urojoną) częstość własną, to nie można wybrać modów własnych tak, aby skonstruowana z nich macierz \hat{K}_0 spełniała powyższy warunek. Tym samym istnieje pełna korespondencja pomiędzy stabilnością układu klasycznego, a kwantowego.

W tym miejscu warto podkreślić, że nawet jeśli hamiltonian nie jest ograniczony od dołu (jak np. w układzie obracającego się z odpowiednio dużą prędkością potencjału harmonicznego opisanego w rozdziale 2), ale posiada wszystkie rzeczywiste częstości własne to istnieje dla takiego układu kwantowy gaussowski stan stacjonarny, choć nie jest to oczywiście stan podstawowy.

W dalszej analizie będę zakładał, że rozpatrujemy układ w obszarze stabilności i tym samym istnieje stacjonarny stan gaussowski dla rozważanego problemu. Dla późniejszych celów oznaczmy taką paczkę (bez unormowania) przez:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \exp\left(-\frac{m}{2\hbar}\mathbf{r}\cdot\hat{K}_0\cdot\mathbf{r}\right), \quad (5.25)$$

gdzie macierz \hat{K}_0 spełnia warunki stacjonarnego kształtu (5.21b).

3 Pozostałe stany stacjonarne

W poprzednim punkcie przedstawiłem przepis na konstrukcję stacjonarnego stanu gaussowskiego naszego układu używając jedynie klasycznych modów własnych. Następnie wykazałem, że jest on jedynym stacjonarnym stanem gaussowskim. Pojawia się naturalnie pytanie o inne stany stacjonarne - najlepiej zupełny ich zbiór. Okazuje się, że wykorzystując znaleziony już stan gaussowski oraz klasyczne mody własne można skonstruować wszystkie stany stacjonarne.

3.1 Ruch paczki o stałym kształcie

Równania (5.7) dopuszczają w oczywisty sposób ewolucję polegającą na ruchu stacjonarnej paczki (5.25) po klasycznej trajektorii. Funkcja falowa opisująca taką sytuację ma postać:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N e^{i\phi(t)/\hbar} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t))\cdot\hat{K}_0\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) + \frac{i\mathbf{P}(t)\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right], \quad (5.26)$$

⁵Niezależność modów jest niezbędna, aby zapewnić nieosobliwość macierzy \hat{D}_0 .

gdzie wektory $\mathbf{R}(t)$ i $\mathbf{P}(t)$ spełniają klasyczne równania ruchu (4.17b). Wybierzmy specyficzne rozwiązanie klasycznych równań ruchu - mod własny o częstości $-\omega_i$:

$$\mathbf{R}(t) = \frac{1}{\kappa} \mathbf{R}_0 e^{-i\omega_i t}, \quad (5.27a)$$

$$\mathbf{P}(t) = \frac{1}{\kappa} \mathbf{P}_0 e^{-i\omega_i t}. \quad (5.27b)$$

\mathbf{R}_0 i \mathbf{P}_0 są amplitudami modu klasycznego spełniające układ równań (4.19), a κ jest dowolną stałą normalizującą mod, którą później wybierzemy w odpowiedni sposób.

Zgodnie z równaniem (5.7e) faza takiej funkcji falowej spełnia równanie:

$$\begin{aligned} \dot{\phi}(t) &= -\frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\Re \hat{K}_0) - \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{R} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R} = \\ &= -\frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\Re \hat{K}_0) + \left(\frac{m}{2\kappa^2} \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 - \frac{\mathbf{P}_0^2}{2m\kappa^2} \right) e^{-2i\omega_i t}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Przy założeniu, że w chwili początkowej faza funkcji falowej była wybrana jako $\phi(0) = 0$ otrzymujemy wzór na fazę:

$$\phi(t) = -\frac{\hbar t}{2} \text{Tr}(\Re \hat{K}_0) + \frac{1}{2i\omega_i} \left(\frac{m}{2\kappa^2} \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 - \frac{\mathbf{P}_0^2}{2m\kappa^2} \right) (1 - e^{-2i\omega_i t}). \quad (5.29)$$

Wtedy funkcja falowa (5.26) (przy wykorzystaniu oznaczenia (5.25)) ma postać:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= N \exp \left[i \frac{\phi}{\hbar} - \frac{m}{2\hbar} \mathbf{R} \cdot \hat{K}_0 \cdot \mathbf{R} + \frac{m}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \hat{K}_0 \cdot \mathbf{R} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{r} \cdot \mathbf{P} \right] \Psi_0(\mathbf{r}) = \\ &= N \exp \left[-\frac{\hbar t}{2} \text{Tr}(\Re \hat{K}_0) + \frac{m^2 \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 - \mathbf{P}_0^2}{4\kappa^2 \hbar \omega_i m} (1 - e^{-2i\omega_i t}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{m}{2\kappa^2 \hbar} \mathbf{R}_0 \cdot \hat{K}_0 \cdot \mathbf{R}_0 e^{-2i\omega_i t} + \mathbf{r} \cdot \left(\frac{m \hat{K}_0 \cdot \mathbf{R}_0 + i \mathbf{P}_0}{\kappa \hbar} \right) \right] \Psi_0(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Wprowadzając następujące oznaczenia:

$$\Omega_0 = \frac{1}{2} \text{Tr}(\Re \hat{K}_0), \quad (5.31a)$$

$$\chi = \frac{1}{4\hbar \omega_i m} \left(\mathbf{P}_0^2 - m^2 \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 \right), \quad (5.31b)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{2\kappa \hbar} \left(m \hat{K}_0 \cdot \mathbf{R}_0 + i \mathbf{P}_0 \right), \quad (5.31c)$$

$$\beta = \frac{1}{4\kappa^2 \hbar \omega_i m} \left[m^2 \mathbf{R}_0 \cdot \left(2\omega_i \hat{K}_0 - \hat{V} \right) \cdot \mathbf{R}_0 + \mathbf{P}_0^2 \right] \quad (5.31d)$$

funkcja falowa daje się zapisać w postaci:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N e^{-\chi} e^{-i\Omega_0 t} \exp \left[-\beta e^{-2i\omega_i t} + 2\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r} e^{-i\omega_i t} \right] \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (5.32)$$

3.2 Wybór modu wzbudzającego

W tym miejscu należy podkreślić, że parametry α i β są równe zero jeśli wybierzemy mod, który został użyty do konstrukcji macierzy \hat{K}_0 . Wtedy bowiem zachodzi następujący związek:

$$\hat{K}_0 \cdot \mathbf{R}_0 = -\frac{i}{m} \mathbf{P}_0. \quad (5.33)$$

Ten wniosek wynika bezpośrednio z konstrukcji macierzy $\hat{K}_0 = -\frac{i}{m} \hat{N}_0 \cdot \hat{D}_0^{-1}$, gdyż jeśli \mathbf{R}_0 i \mathbf{P}_0 są k -tymi kolumnami odpowiednio macierzy \hat{D}_0 i \hat{N}_0 , to oczywiście mamy:

$$\hat{D}_0^{-1} \cdot \mathbf{R}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

gdzie 1 stoi na k -tym miejscu, a na pozostałych 0. Stąd automatycznie wynika, że parametr α zadany wzorem (5.31c) równy jest 0.

Dodatkowo należy zauważyć (wykorzystując zależność 5.33), że w takim przypadku równanie (5.31d) na β ma postać:

$$\beta = \frac{1}{4\kappa^2 \hbar \omega_i} \left(-2i\omega_i \mathbf{R}_0 \cdot \mathbf{P}_0 - m \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 + \frac{1}{m} \mathbf{P}_0^2 \right). \quad (5.35)$$

Z drugiej strony jednak wiemy, że amplitudy \mathbf{R}_0 i \mathbf{P}_0 muszą spełniać równania wynikające z warunku (4.19):

$$-\hat{\Omega} \cdot \mathbf{R}_0 - i\omega_i \mathbf{R}_0 + \frac{1}{m} \mathbf{P}_0 = 0, \quad (5.36a)$$

$$-m \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{P}_0 - i\omega_i \mathbf{P}_0 = 0. \quad (5.36b)$$

Mnożąc równanie (5.36a) skalarnie przez \mathbf{P}_0 , a równanie (5.36b) skalarnie przez \mathbf{R}_0 oraz dodając do siebie i wykorzystując antysymetryczność macierzy $\hat{\Omega}$ otrzymujemy:

$$-2i\omega_i \mathbf{R}_0 \cdot \mathbf{P}_0 - m \mathbf{R}_0 \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}_0 + \frac{1}{m} \mathbf{P}_0^2 = 0. \quad (5.37)$$

Zatem w tym przypadku również parametr β opisany wzorem (5.35) jest równy 0 i funkcja falowa (5.32) sprowadza się do już znanego stacjonarnego stanu gaussowskiego (5.25).

Od tej pory, bez zmniejszania ogólności rozważań, będziemy zakładać, że wybrany przez nas mod nie posłużył do skonstruowania macierzy \hat{K}_0 .

3.3 Rozwinięcie w stany stacjonarne

Okazuje się, że funkcja falowa (5.32) jest superpozycją całej rodziny funkcji własnych naszego problemu - rodziny wzbudzeń o częstości ω_i .

Po pierwsze zauważmy, że dowolna dotychczas zmienna κ może nam teraz posłużyć, aby uprościć wyrażenie na funkcję falową. Jeśli bowiem wybierzemy ją odpowiednio, to możemy sprawić, że współczynnik $\beta = 1$. Spowoduje to odpowiednie przeskalowanie wektora α . Funkcja falowa ma wtedy postać:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N e^{-\chi} e^{-i\Omega_0 t} \exp[-e^{-2i\omega_i t} + 2\alpha \cdot \mathbf{r} e^{-i\omega_i t}] \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (5.38)$$

W tym momencie należy przypomnieć znany powszechnie fakt o funkcji tworzącej dla wielomianów Hermite'a $H_n(\xi)$. Otóż zachodzi zależność (patrz np. [7]):

$$e^{-z^2 + 2\xi z} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{z^n}{n!}. \quad (5.39)$$

Przeprowadzając to rozwinięcie w funkcji falowej (5.38) (dla $\xi = \alpha \cdot \mathbf{r}$ i $z = e^{-i\omega_i t}$) otrzymujemy:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N e^{-\chi} e^{-i\Omega_0 t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\alpha \cdot \mathbf{r}) e^{-in\omega_i t} \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (5.40)$$

Widzimy zatem, że nasza funkcja falowa jest superpozycją stanów, których ewolucja polega jedynie na ewolucji fazy - stanów stacjonarnych. Dla każdego n mamy określony jeden stan stacjonarny, czyli n -te wzbudzenie i -tego modu. Zatem funkcją falową stanu stacjonarnego (nieunormowaną) jest:

$$\Psi_n^{(i)}(\mathbf{r}) = H_n(\alpha \cdot \mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (5.41)$$

Funkcja ta jest funkcją własną hamiltonianu z wartością własną $E_n^{(i)} = \hbar n \omega_i + \hbar \Omega_0$. Przeprowadzając w ten sposób konstrukcję dla wszystkich modów własnych otrzymujemy wzbudzenia pozostałych modów.

Jak już wcześniej wspominałem rozwinięcie w inne stany stacjonarne jest możliwe tylko poprzez wykorzystanie modów, które nie posłużyły do konstrukcji macierzy \hat{K}_0 . W tym momencie fakt ten ma bardzo dobrą interpretację fizyczną. Otóż jeśli hamiltonian (4.16) jest dodatnio określony, to poprawną macierz \hat{K}_0 otrzymuje się wybierając do jej konstrukcji mody o dodatnich częstościach własnych. Wtedy do konstruowania stanów wzbudzonych poprzez rozwinięcie (5.38) używamy modów o częstościach ujemnych. W ten sposób powstające funkcje falowe opisują stacjonarne stany kwantowe, które są funkcjami własnymi hamiltonianu, których wartość własna rośnie z n . Z drugiej strony, jeśli hamiltonian nie jest dodatnio określony, to niektóre z modów wybranych do konstrukcji macierzy \hat{K}_0 mają ujemną częstość. Tym samym do konstruowania niektórych stanów wzbudzonych będziemy używali modów o dodatniej częstości i tym samym ich wartość własna będzie malała z n i nie będzie ograniczona od dołu.

Ostatecznie, ponieważ udało się skonstruować wzbudzenia dla każdego n dla każdej częstości własnej, a z drugiej strony wiemy, że układ daje się sprowadzić transformacją kanoniczną do układu trzech niezależnych oscylatorów harmonicznym, to tym samym udało nam się skonstruować zupełny układ stanów własnych hamiltonianu kwantowo-mechanicznego.

Rozdział 6

Jakościowe uwzględnienie oddziaływań

W ostatnim rozdziale swojej pracy postaram się przedstawić prosty model teoretyczny umożliwiający jakościowe uwzględnienie wpływu oddziaływań międzyatomowych na dynamikę układu. Oczywiście dotychczasowe rozważania na temat dynamiki środka masy układu są wciąż aktualne, gdyż jak już wykazałem w pierwszym rozdziale jest ona całkowicie odseparowana i niezależna od dynamiki wewnętrznej układu. Jest to szczególna własność dynamiki w potencjałach harmonicznym.

1 Nieliniowe równania Schrödingera

Uwzględnienia oddziaływań międzyatomowych dokonam w najprostszy możliwy sposób - metodą pola średniego. Punktem wyjścia jest hamiltonian oddziałującego układu bozonów w języku drugiej kwantyzacji (1.14):

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \int d^3\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \\ &+ \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (6.1)$$

Wykorzystując równania Heisenberga (patrz np. [6, 25]) z wielociałowym hamiltonianem (6.1) wyprowadzamy równania na ewolucję operatorów pola¹:

$$\begin{aligned}i\hbar \partial_t \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) &= \left[\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\mathcal{H}} \right] = \\ &= \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{m}{2} \mathbf{r} \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{r} + \int d^3\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}, t).\end{aligned}$$

W następnym kroku rozkładamy nasz operator pola na dwie części - jego wartość oczekiwaną $\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$ oraz całą resztę $\hat{\psi}'(\mathbf{r}, t)$:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) + \hat{\psi}'(\mathbf{r}, t). \quad (6.2)$$

¹Wykorzystujemy relacje komutacyjne dla bozonowych operatorów pola (1.12).

Funkcja $\Psi(\mathbf{r}, t)$ będzie pełniła rolę parametru porządku, a historycznie nazywa się ją *funkcją falową układu*². Celem rozważanej przez nas teorii pola średniego jest znalezienie równań dynamicznych na tą właśnie wielkość przy założeniu, że właśnie ta wielkość w pewnym przybliżeniu opisuje dobrze zachowanie naszego układu, tzn. część operatorowa $\hat{\psi}'$ jest w jakimś sensie mała i można ją traktować jako zaburzenie.

W takim przypadku równanie na ewolucję (6.2) w pierwszym przybliżeniu ma postać:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r} + \int d^3\mathbf{r}' \Psi^*(\mathbf{r}', t)U(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.3)$$

Otrzymane równanie jest równaniem nieliniowym na funkcję falową $\Psi(\mathbf{r}, t)$ dlatego nazywa się je *nieliniowym równaniem Schrödingera*. Warto podkreślić w tym miejscu, że nie podważamy jednak tym samym postulatu mechaniki kwantowej o jej liniowym charakterze. Nielinowość pojawiła się wyłącznie z powodu naszego przybliżenia operatora pola przez jego wartość oczekiwaną.

Przybliżenie takie pracuje najlepiej, gdy poszczególne atomy oddziałują ze sobą jedynie na bardzo krótkich odległościach. Takie oddziaływanie możemy zamodelować potencjałem typu δ (patrz np. [25]), tzn. przyjąć, że oddziaływanie następuje jedynie, gdy cząstki się znajdują w tym samym punkcie przestrzeni³:

$$U(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = g\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (6.4)$$

W zależności od znaku stałej g oddziaływanie między atomami jest przyciągające lub odpychające.

Przy zastosowaniu takiego modelu oddziaływania równanie (6.3) ma postać:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r} + g|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (6.5)$$

Jest to tzw. *równanie Grossa-Pitaevskiego*⁴ wyprowadzone niezależnie jeszcze w latach '60 przez Grossa [24] i Pitaevskiego [23]. Równanie to jest bardzo często punktem wyjścia przy opisie kwantowo-mechanicznym zjawiska kondensacji Bosego-Einsteina i jego własności są gruntownie przestudiowane (np. w przeglądowym artykule [25]).

2 Logarytmiczne równanie Schrödingera

Równanie Grossa-Pitaevskiego (6.5) jest dobrze uzasadnionym równaniem w przypadku układów, w których zachodzi kondensacja Bosego-Einsteina i daje wyniki, które dobrze pasują do danych doświadczalnych [25]. Jest to jednak równanie bardzo skomplikowane i jego rozwiązania są znane jedynie numerycznie w konkretnych sytuacjach.

²Jest tak dlatego, że wyrażenie $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ jest w pewnych warunkach proporcjonalne do gęstości atomów w punkcie \mathbf{r} .

³Jest to oczywiście skrajny model matematyczny oddziaływania krótkozasięgowego.

⁴Równanie Grossa-Pitaevskiego formuuje się najczęściej w ogólniejszej postaci dla dowolnego potencjału zewnętrznego. Wtedy zamiast wyrażenia $\frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r}$ pojawia się dowolny potencjał $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$.

W latach '70 zupełnie z innych powodów [26] rozważano inne równanie typu nieliniowych równań Schrödingera, tzw. *logarytmiczne równanie Schrödingera*, którym również można symulować oddziaływanie międzyatomowe w układzie. Równanie to ma postać:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) - b\log\left(\frac{1}{a^3}|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\right) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (6.6)$$

gdzie stała b ma wymiar energii i określa „siłę” oddziaływania międzyatomowego. Stała a jest jedynie stałą wymiarową zapewniającą bezwymiarowość argumentu funkcji logarytm. Nie ma ona znaczenia fizycznego, gdyż jest niemierzalna w żadnym eksperymencie. W każdym przyjętym układzie jednostek możemy przyjąć, że jest równa 1.

Równanie (6.6) ma bardzo wiele ciekawych własności [26, 27], ale jedna z nich jest dla nas kluczowo ważna i jest powodem zastosowania tego równania, a nie równania Grossa-Pitaevskiego w dalszej analizie - znane jest jedno analityczne stacjonarne rozwiązanie równania (6.6) w przypadku układów liniowych. Jest to rozwiązanie gaussowskie. Zilustrujmy tę własność w najprostszym przypadku - jednowymiarowym oscylatorze harmonicznym.

2.1 Logarytmiczne równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego

Stacjonarne logarytmiczne równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego o częstości własnej ω ma postać ($a = 1$):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - b\log(|\psi|^2) \right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (6.7)$$

Po wprowadzeniu nowych bezwymiarowych wielkości ξ , ϵ , γ (długość, energia, stała oddziaływania):

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi, \quad E = \frac{\hbar\omega}{2}\epsilon, \quad b = \hbar\omega\gamma \quad (6.8)$$

równanie (6.7) można zapisać w postaci:

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 - 2\gamma\log(|\psi|^2) \right) \psi(\xi) = \epsilon\psi(\xi). \quad (6.9)$$

Łatwo można się przekonać, że unormowana funkcja gaussowska:

$$\psi(\xi) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha\xi^2}{2}}, \quad \alpha > 0 \quad (6.10)$$

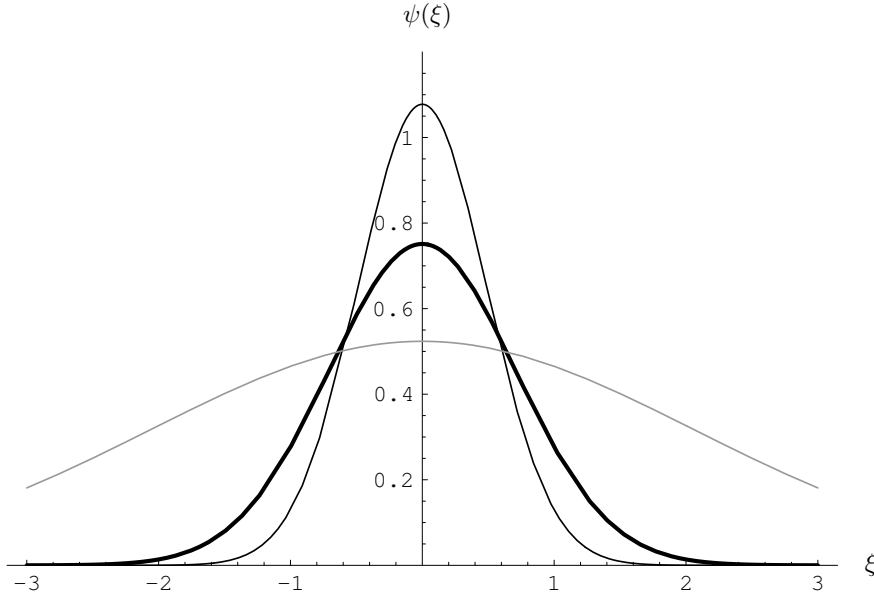
spełnia równanie (6.9) dla dowolnego γ . Rzeczywiście, wstawiając tę funkcję do równania (6.9) otrzymujemy:

$$\alpha - \alpha^2\xi^2 + \xi^2 - \gamma\log\frac{\alpha}{\pi} + 2\alpha\gamma\xi^2 = \epsilon. \quad (6.11)$$

Ponieważ równanie to musi być spełnione dla dowolnego ξ otrzymujemy warunek na parametr α opisujący kształt paczki gaussowskiej oraz jej bezwymiarową energię ϵ :

$$1 - \alpha^2 + 2\alpha\gamma = 0, \quad (6.12a)$$

$$\alpha - \gamma\log\frac{\alpha}{\pi} = \epsilon. \quad (6.12b)$$



Rysunek 6.1: Rozwiązanie stacjonarnego logarytmicznego równania Schrödingera (6.9) dla trzech różnych wartości parametru γ . Rozwiązanie równania bez nieliniowości ($\gamma = 0$) ilustruje linia czarna pogrubiona. Linie cienkie ilustrują rozwiązania równania z nieliniowością: czarna przyciągająca ($\gamma = 2$), szara odpychająca ($\gamma = -2$).

Z równania (6.12a) wynika, że $\alpha = \gamma + \sqrt{\gamma^2 + 1}$ opisuje stacjonarną paczkę gaussowską⁵ dla dowolnego γ . Jak widać z rysunku 6.1 dodatnie γ można interpretować jako efektywne oddziaływanie przyciągające, a γ ujemne jako odpychające.

Ta podstawowa własność równania logarytmicznego, tzn. istnienie gaussowskiego rozwiązania stacjonarnego dla układów liniowych, pozwala dokładnie przeanalizować wpływ nieliniowości na dynamikę układu i jakościowe uwzględnienie oddziaływania w opisie.

3 Logarytmiczne równanie Schrödingera dla wirującej pułapki

Uwzględnienie jakościowe oddziaływań międzyatomowych w obracającej się pułapce harmoniczej oznacza (patrz [2]) zastąpienie równania Schrödingera (5.1) przez równanie (6.6) z odpowiednimi członami odpowiadającymi za siły pułapki i siły pozorne⁶ (pomijamy nieistotną stałą a):

$$i\hbar\partial_t\Psi(\mathbf{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{\hbar}{i}\mathbf{r}\cdot\hat{\Omega}\cdot\nabla + \frac{m}{2}\mathbf{r}\cdot\hat{V}\cdot\mathbf{r} - b\log(|\Psi(\mathbf{r},t)|^2) \right] \Psi(\mathbf{r},t). \quad (6.13)$$

⁵Drugie rozwiązanie równania kwadratowego (6.12a) $\alpha = \gamma - \sqrt{\gamma^2 + 1}$ jest zawsze ujemne i tym samym nie opisuje paczki gaussowskiej.

⁶Problem rozwiązujemy tak jak dotychczas - w układzie obracającym się razem z pułapką

3.1 Ewolucja paczki gaussowskiej

Podobnie jak to było zrobione w rozdziale 5. analizę dynamiki kwantowej rozpoczynamy od analizy dynamiki paczki gaussowskiej. W tym celu rozważamy najogólniejszą paczkę gaussowską postaci:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = N(t)e^{i\phi(t)/\hbar} \exp\left(-\frac{m}{2\hbar}(\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) \cdot \hat{K}(t) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)) + \frac{i}{\hbar}\mathbf{r} \cdot \mathbf{P}(t)\right). \quad (6.14)$$

Przeprowadzając analogiczne rachunki jak w punkcie 1.2 rozdziału 5. otrzymujemy wzory na ewolucję parametrów paczki podobne do wzorów (5.7). Tym razem spodziewamy się jednak, że parametr mierzący nieliniowość b pojawi się w tych wzorach. Równania ewolucji mają postać:

$$\frac{d\hat{K}(t)}{dt} = -i\hat{K}(t)^2 + i\hat{V} - [\hat{\Omega}, \hat{K}(t)] + 2i\frac{mb}{\hbar}\Re\hat{K}(t), \quad (6.15a)$$

$$\frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} = \frac{\mathbf{P}(t)}{m} - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{R}(t), \quad (6.15b)$$

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = -m\hat{V} \cdot \mathbf{R}(t) - \hat{\Omega} \cdot \mathbf{P}(t), \quad (6.15c)$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{N(t)}{2}\text{Tr}(\Im\hat{K}(t)), \quad (6.15d)$$

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{\hbar}{2}\text{Tr}(\Re\hat{K}(t)) - \frac{\mathbf{P}(t)^2}{2m} + \frac{m}{2}\mathbf{R}(t) \cdot \hat{V} \cdot \mathbf{R}(t). \quad (6.15e)$$

Jak widać z powyższych wzorów tym razem również dynamika środka masy całkowicie się odseparowała od dynamiki wewnętrznej. Jest to oczywiście zgodne z wynikami przedstawionymi w rozdziale 1. Jak bowiem jest tam wykazane separacja taka zachodzi niezależnie od postaci oddziaływań międzyatomowych, które doprowadziły nas do nieliniowego równania Schrödingera.

Własnością logarytmicznego równania Schrödingera jest natomiast fakt, że cała informacja o nieliniowości uwidacznia się jedynie we wzorze na ewolucję kształtu paczki (6.15a). Oczywiście ta nieliniowość wpływa również pośrednio na ewolucję stałej normalizacyjnej i fazy (wzory (6.15d) i (6.15e)), gdyż występuje tam zależność od macierzy $\hat{K}(t)$.

Jak widać ze wzoru (6.15a) nieliniowość sprzęga się do części rzeczywistej macierzy $\hat{K}(t)$. Tym samym równanie (6.15a) przestaje być *macierzowym równaniem Riccatiego* i nieznanym jest sposób poszukiwania analitycznego rozwiązania takiego równania.

3.2 Rozwiązania stacjonarne

Podobnie jak w przypadku bez nieliniowości w stanie stacjonarnym środek masy musi być w stanie równowagi (jedyne stan równowagi opisany jest warunkami $\mathbf{R}(t) = 0$ i $\mathbf{P}(t) = 0$). Istotne pozostaje zatem jedynie równanie na kształt \hat{K}_0 stacjonarnego stanu gaussowskiego wynikające z równania (6.15a) i warunku $d\hat{K}_0/dt = 0$ (od teraz przyjmujemy taki układ jednostek, w którym $m = 1$, $\hbar = 1$):

$$0 = -i\hat{K}_0^2 + i\hat{V} - [\hat{\Omega}, \hat{K}_0] + 2ib\Re\hat{K}_0 \quad (6.16)$$

lub rozdzielając macierz \hat{K}_0 na część rzeczywistą i urojoną $\hat{K}_0 = \hat{A} + i\hat{B}$ otrzymujemy równoważny równaniu (6.16) układ dwóch równań macierzowych:

$$0 = \hat{B} \cdot \hat{A} + \hat{A} \cdot \hat{B} - [\hat{\Omega}, \hat{A}], \quad (6.17a)$$

$$0 = \hat{B}^2 - \hat{A}^2 + \hat{V} - [\hat{\Omega}, \hat{B}] + 2b\hat{A}. \quad (6.17b)$$

Równania (6.17) są nieliniowymi równaniami macierzowymi i dlatego ich rozwiązanie w trzech wymiarach jest bardzo trudne. Głównym celem rozważań tego rozdziału jest jednak jedynie jakościowe zbadanie wpływu nieliniowości na dynamikę i dlatego w tym miejscu upraszczamy nasz problem zakładając, że pułapka obraca się wokół osi równoległej do jednej z osi głównych pułapki. Jak było pokazane w rozdziale 2. W takim przypadku dynamika wzdłuż kierunku osi obrotu całkowicie odseparowuje się od pozostałych stopni swobody i w naszym przypadku będzie opisywana tak jak jest przedstawione w punkcie 2.1. Pozostaje zatem do rozważenia przypadek dwuwymiarowy opisujący pozostałe stopnie swobody za pomocą macierzy 2×2 spełniających równania (6.17).

Rozwiązań będziemy poszukiwać (tak jak w pracy [2]) w układzie odniesienia, w którym macierz \hat{V} jest diagonalna. Macierze \hat{V} i $\hat{\Omega}$ mają zatem postać:

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_x & 0 \\ 0 & V_y \end{pmatrix}, \quad \hat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.18)$$

Macierze \hat{A} i \hat{B} parametryzujemy następująco:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha \\ \alpha & \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \beta_1 & \beta \\ \beta & \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (6.19)$$

Przy takiej parametryzacji równania (6.17) sprowadzają się do następującego układu sześciu równań:

$$0 = \beta_1 \alpha_1 + \alpha(\beta + \Omega), \quad (6.20a)$$

$$0 = \beta_2 \alpha_2 + \alpha(\beta - \Omega), \quad (6.20b)$$

$$0 = (\beta_1 + \beta_2)\alpha + \beta(\alpha_1 + \alpha_2) + \Omega(\alpha_2 - \alpha_1), \quad (6.20c)$$

$$0 = \beta^2 + \beta_1^2 - \alpha^2 - \alpha_1^2 + 2b\alpha_1 + V_x + 2\Omega\beta, \quad (6.20d)$$

$$0 = \beta^2 + \beta_2^2 - \alpha^2 - \alpha_2^2 + 2b\alpha_2 + V_y - 2\Omega\beta, \quad (6.20e)$$

$$0 = (2b - \alpha_1 - \alpha_2)\alpha + \Omega(\beta_2 - \beta_1) + \beta(\beta_1 + \beta_2). \quad (6.20f)$$

W dodatku C w punkcie 3. pokazane jest, że jeśli pułapka nie jest symetryczna (tzn. $V_x \neq V_y$), to rozwiązanie powyższego układu równań istnieje tylko wtedy, gdy $\alpha = \beta_1 = \beta_2 = 0$, tzn. macierz \hat{A} musi być diagonalna⁷, a macierz \hat{B} pozadiagonalna. Tym samym zagadnienie sprowadza się do rozwiązania trzech równań na pozostałe niewiadome α_1 , α_2 i β :

⁷Stale α_1 i α_2 stają się wartościami własnymi macierzy \hat{A} .

$$(\alpha_1 + \alpha_2)\beta - (\alpha_1 - \alpha_2)\Omega = 0, \quad (6.21a)$$

$$\beta^2 - \alpha_1^2 + V_x^2 + 2b\alpha_1 + 2\beta\Omega = 0, \quad (6.21b)$$

$$\beta^2 - \alpha_2^2 + V_y^2 + 2b\alpha_2 + 2\beta\Omega = 0. \quad (6.21c)$$

Pułapka spoczywająca ($\Omega = 0$)

Na początku zbadajmy zachowanie się rozwiązania, gdy pułapka się nie obraca. W takim przypadku z równania (6.21a) od razu wynika, że współczynnik $\beta = 0$ i pozostałe dwa równania są prostymi równaniami kwadratowymi na α_1 i α_2 :

$$-\alpha_1^2 + V_x^2 + 2b\alpha_1 = 0, \quad (6.22a)$$

$$-\alpha_2^2 + V_y^2 + 2b\alpha_2 = 0. \quad (6.22b)$$

Są to odpowiedniki równania (6.12a) definiującego kształt stacjonarnego rozwiązania dla jednowymiarowego oscylatora harmonicznego. Zatem, tak jak należało się spodziewać, problem rozseparował się na niezależne jednowymiarowe oscylatory harmoniczne opisane logarytmicznym równaniem Schrödingera (6.7).

Ostatecznie, w przypadku nieobracającej się pułapki harmonicznego istnieje jedno⁸ rozwiązanie gaussowskie logarytmicznego równania Schrödingera:

$$\alpha_1 = b + \sqrt{b^2 + V_x^2}, \quad (6.23a)$$

$$\alpha_2 = b + \sqrt{b^2 + V_y^2}, \quad (6.23b)$$

$$\beta = 0. \quad (6.23c)$$

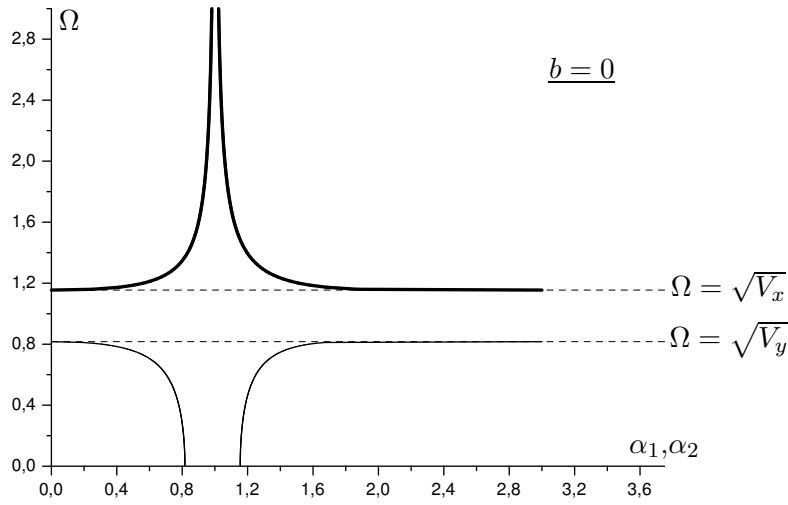
Warto podkreślić w tym miejscu, że rozwiązanie gaussowskie zawsze istnieje, nawet dla bardzo silnego oddziaływania odpychającego (ujemne b).

Brak oddziaływania ($b = 0$)

Drugim przypadkiem szczególnym jest pułapka obracająca się, ale z „wyłączonym” oddziaływaniem prowadzącym do nieliniowego równania Schrödingera. Jest to oczywiście przypadek już dyskutowany w poprzednich rozdziałach.

Zależność wartości własnych części rzeczywistej macierzy \hat{K}_0 (determinującej kształt paczki gaussowskiej) od prędkości obrotu pułapki przedstawia dla przykładowej pułapki ($V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$) rysunek 6.2. Z rysunku widać, że paczka gaussowska jest stabilna, tzn. macierz \hat{A} ma dodatnie wartości własne, w tych przedziałach prędkości obrotu pułapki, w których stabilna jest klasyczna dynamika układu (patrz rysunek 2.4 oraz punkt 5. w rozdziale 2).

⁸Tylko jedno rozwiązanie każdego z równań (6.22) jest dodatnie; podobnie jak było z równaniem (6.12a).



Rysunek 6.2: Wykres przedstawia zależność parametrów α_1 i α_2 w zależności od prędkości kątowej pułapki Ω przy braku członu nieliniowego. Dla każdej wartości Ω z obszaru stabilności istnieje dokładnie jedno rozwiązanie stacjonarne opisane parametrami α_1 i α_2 . Parametry pułapki: $V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$.

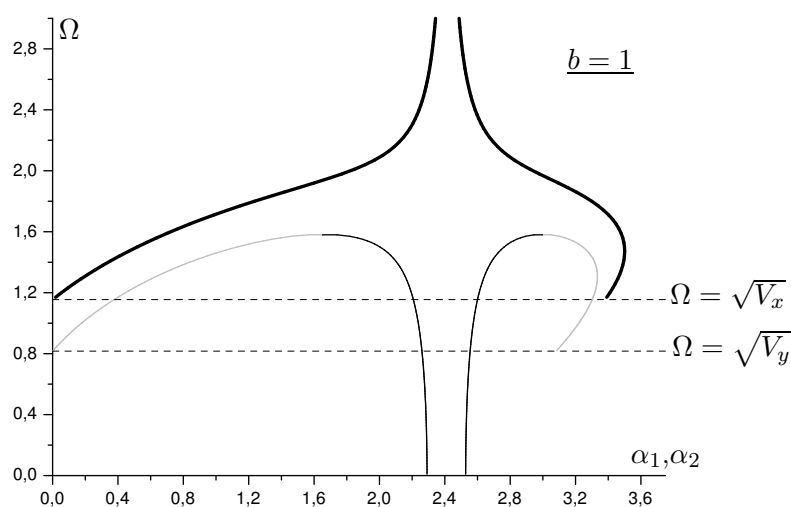
Przypadek ogólny ($b \neq 0$ i $\Omega \neq 0$)

W ogólnym przypadku analityczne rozwiązanie równań (6.21) jest niemożliwe, gdyż jest to układ równań nieliniowych prowadzących do równań wyższych rzędów na współczynniki α_1 , α_2 i β . Dlatego w tym przypadku rozwiązywałem je numerycznie dla konkretnie wybranej pułapki harmoniczej ($V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$) oraz dwóch wartości parametru b określającego wpływ nieliniowości. Okazuje się, że w przypadku logarytmicznego równania Schrödingera mogą istnieć, przy pewnych warunkach, równocześnie dwa, a nawet trzy rozwiązania gaussowskie.

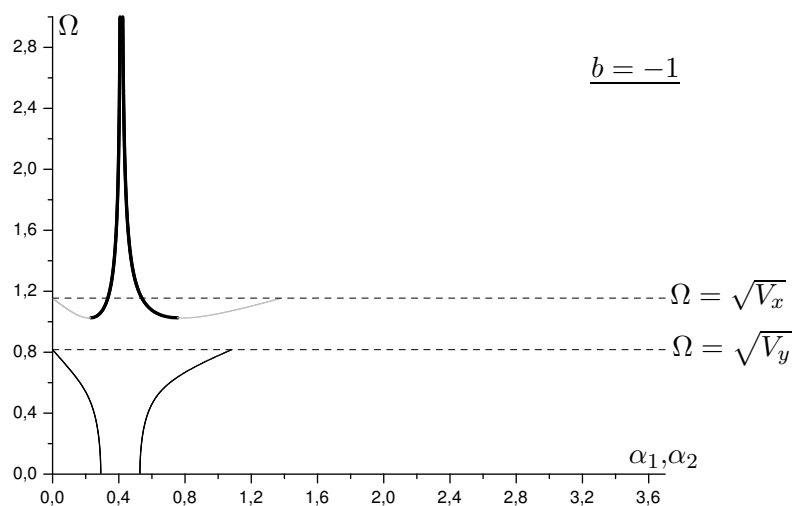
Jak widać z rysunku 6.3 dla oddziaływania przyciągającego ($b = 1$) dodatkowe rozwiązanie pojawia się w tym przedziale prędkości obrotu pułapki, dla którego klasyczna dynamika jest niestabilna oraz ponad tym przedziałem. W zależności od siły przyciągania mierzonym stałą b można sprawić, że dla odpowiednio silnego przyciągania w ogóle nie istnieje obszar niestabilności dla rozwiązania kwantowego. Tzn. paczka gaussowska jest stabilna, natomiast jako całość zgodnie z równaniami (6.15b) i (6.15c) ucieka z pułapki.

Dla oddziaływania odpychającego ($b = -1$) sytuacja jest najbardziej zaskakująca (rysunek 6.4). Okazuje się bowiem, że również w tym przypadku dynamika może być stabilizowana, choć mamy do czynienia z odpychaniem. Jak widać na rysunku 6.4 w obszarze klasycznej niestabilności istnieją rozwiązania gaussowskie logarytmicznego równania Schrödingera.

Ta jakościowa analiza wpływu oddziaływań wewnętrznych na dynamikę układu pokazuje, że nieliniowość w równaniu Schrödingera może dramatycznie zmieniać własności układu, a odpychanie może stabilizować dynamikę. Te ciekawe własności nieliniowych równań Schrödingera mają szczególne znaczenie np. przy dyskusowaniu własności kondensatu Bosego-Einsteina [25].



Rysunek 6.3: Wykres przedstawia zależność parametrów α_1 i α_2 w przypadku przyciągającego oddziaływania nieliniowego. Dla odpowiednio silnego oddziaływania (ten przypadek) zawsze istnieją stabilne rozwiązania. Dla małych i dużych prędkości kątowych istnieje tylko jedno rozwiązanie stacjonarne, ale dla pośrednich istnieją dwa, a nawet trzy współistniejące rozwiązania. Odpowiednie pary parametrów α oznaczone są tym samym stylem linii. Parametry pułapki: $V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$.



Rysunek 6.4: Wykres przedstawia parametry α_1 i α_2 dla odpychającego oddziaływania. Choć jest dodatkowe odpychanie w układzie, to w porównaniu z przypadkiem braku nieliniowości (rysunek 6.2) zmniejszył się obszar niestabilności! Jest to bardzo zaskakujące, gdyż niestabilność ta jest wywołana siłą odśrodkową - również odpychającą. W tym obszarze są dopuszczalne aż dwa niezależne rozwiązania gaussowskie, których parametry oznaczone są tym samym stylem linii. Parametry pułapki: $V_x = 2/3$ i $V_y = 4/3$.

Dodatek A

Wyznaczenie stałych ruchu

W tym dodatku opisany jest sposób znalezienia stałych ruchu dyskutowanych w punkcie 3.2 z rozdziału 2. Są one sparametryzowane macierzami \hat{U} , \hat{T} i \hat{W} , z czego dwie pierwsze są symetryczne. Jak dowodzę w punkcie 3.2 macierze te parametryzują stałe ruchu jeśli spełniają macierzowy układ równań (2.21). Aby znaleźć rozwiązania tych równań użyłem programu do obliczeń symbolicznych *Maple 8* rozpisując ten układ równań w pewnym wybranym układzie współrzędnych.

1 Przypadek zdegenerowany

Na początku przedyskutuję poszukiwanie tych stałych w przypadku zdegenerowanym - gdy obrót odbywa się wokół jednej z osi pułapki. Wtedy ruch względem tej osi odseparowuje się i pozostajemy z problemem dwuwymiarowym. Bez zmniejszania ogólności wybieramy układ współrzędnych, w którym obrót odbywa się wokół osi z pułapki i macierz potencjału \hat{V} jest diagonalna:

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} V_x & 0 \\ 0 & V_y \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Macierze opisujące kwadratowe stałe ruchu parametryzujemy następująco:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} U_{xx} & U_{xy} \\ U_{xy} & U_{yy} \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xy} \\ T_{xy} & T_{yy} \end{pmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{pmatrix} W_{xx} & W_{xy} \\ W_{yx} & W_{yy} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

W takim przypadku układ równań (2.21) jest równoważny następującemu układowi zwykłych równań algebraicznych:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -2\Omega & 0 & 0 & 0 & -2V_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & -2V_y & 0 & 0 \\ \Omega & -\Omega & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_y & -V_x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\Omega & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\Omega & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Omega & -\Omega & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -V_x & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Omega & -\Omega \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -V_y & 0 & 0 & 0 & \Omega & \Omega \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -V_x & \Omega & -\Omega & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -V_y & \Omega & -\Omega & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{xx} \\ U_{yy} \\ U_{xy} \\ T_{xx} \\ T_{yy} \\ T_{xy} \\ W_{xx} \\ W_{yy} \\ W_{xy} \\ W_{yx} \end{pmatrix} = 0.$$

Zatem w tej reprezentacji stałe ruchu są opisane wektorami rozpinającymi jądro występującej tu macierzy. Za pomocą programu *Maple 8* łatwo sprawdzić (komenda `rank`), że jądro tej macierzy jest dwuwymiarowe, zatem istnieją dwie stałe ruchu. Są one opisane za pomocą następujących wektorów (komenda `kernel`):

$$\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\Omega \\ \Omega \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} V_x^2 + \Omega^2(V_y - V_x) \\ V_y^2 + \Omega^2(V_x - V_y) \\ 0 \\ V_x \\ V_y \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2\Omega^3 - \Omega(2V_x + V_y) \\ -2\Omega^3 + \Omega(2V_y + V_x) \end{pmatrix}$$

Łatwo można sprawdzić, że te dwie stałe ruchu można sprowadzić do postaci niezależnej od naszej parametryzacji i dają się zapisać w postaci podanej przez wzory (2.23). Są to właśnie szukane stałe ruchu.

2 Przypadek ogólny

Przepis szukania stałych ruchu podany w przypadku zdegenerowanym możemy również zastosować w przypadku ogólnym. Tym razem (obrót następuje wokół dowolnie zorientowanej osi) problem jest bardziej skomplikowany, ale również daje się do końca rozwiązać. W tym celu wybieramy nasz układ współrzędnych tak, aby prędkość kątowa i macierz potencjału miały postać:

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\Omega_z & \Omega_y \\ \Omega_z & 0 & -\Omega_x \\ -\Omega_y & \Omega_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_y & 0 \\ 0 & 0 & V_z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Macierze opisujące stałe ruchu parametryzujemy następująco:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} U_{xx} & U_{xy} & U_{xz} \\ U_{xy} & U_{yy} & U_{yz} \\ U_{xz} & U_{yz} & U_{zz} \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{xy} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{xz} & T_{yz} & T_{zz} \end{pmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{pmatrix} W_{xx} & W_{xy} & W_{xz} \\ W_{yx} & W_{yy} & W_{yz} \\ W_{zx} & W_{zy} & W_{zz} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

W takiej parametryzacji macierzowy układ równań (2.21) jest równoważny układowi równań (A.5) podanemu na następnej stronie. W tym przypadku występująca tu macierz ma jądro trójwymiarowe co znaczy, że występują trzy stałe ruchu. Analogicznie jak poprzednio można znaleźć bazę rozpinającą jądro tej macierzy¹ i sprowadzić do postaci niezależnej od wyboru bazy i parametryzacji. Mają one wtedy postać zadaną przez wzory (2.22).

¹Sama postać wektorów jest dużo bardziej skomplikowana, dlatego zrezygnowałem z ich wypisania.

$$\hat{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & -2\Omega_z & 2\Omega_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2V_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\Omega_z & -\Omega_z & 0 & 0 & -\Omega_x & \Omega_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_y & -V_x & 0 & 0 & 0 \\
-\Omega_y & 0 & \Omega_y & \Omega_x & 0 & -\Omega_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_z & -V_x & 0 \\
0 & 0 & 0 & 2\Omega_z & 0 & -2\Omega_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2V_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \Omega_x & -\Omega_x & -\Omega_y & \Omega_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_z & -V_y \\
0 & 0 & 0 & 0 & -2\Omega_y & 2\Omega_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2V_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\Omega_z & 2\Omega_y & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_z & -\Omega_z & 0 & 0 & -\Omega_x & \Omega_y & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Omega_y & 0 & \Omega_y & \Omega_x & 0 & -\Omega_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\Omega_z & 0 & -2\Omega_x & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_x & -\Omega_x & -\Omega_y & \Omega_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\Omega_y & 2\Omega_x & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Omega_z & -\Omega_z & \Omega_y & \Omega_y & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_x & 0 & 0 & \Omega_z & -\Omega_z & 0 & 0 & -\Omega_x & 0 & 0 & \Omega_y \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_x & 0 & -\Omega_y & 0 & \Omega_x & 0 & 0 & 0 & -\Omega_z & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_y & 0 & 0 & \Omega_z & -\Omega_z & 0 & 0 & 0 & -\Omega_x & \Omega_y & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_z & \Omega_z & 0 & 0 & -\Omega_x & -\Omega_x \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_y & 0 & \Omega_x & -\Omega_x & 0 & -\Omega_y & \Omega_z & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_z & 0 & -\Omega_y & 0 & \Omega_y & 0 & \Omega_x & 0 & 0 & -\Omega_z \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_z & 0 & \Omega_x & -\Omega_x & -\Omega_y & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -V_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Omega_z & \Omega_x
\end{pmatrix}$$

$$\hat{\mathcal{X}} \begin{pmatrix}
U_{xxx} \\
U_{yy} \\
U_{zz} \\
U_{xy} \\
U_{xz} \\
U_{yz} \\
T_{xx} \\
T_{yy} \\
T_{zz} \\
T_{xy} \\
T_{xz} \\
T_{yz} \\
W_{xxx} \\
W_{yy} \\
W_{zz} \\
W_{xy} \\
W_{yx} \\
W_{xz} \\
W_{zx} \\
W_{yz} \\
W_{zy}
\end{pmatrix} = 0$$

(A.5)

Dodatek B

Programy do symulowania trajektorii

Trajektorie z punktu 6. w rozdziale 2. oraz z rozdziału 3. symulowałem na komputerze za pomocą samodzielnie napisanych programów w języku *Pascal*. Ponieważ równania ruchu są liniowe to do całkowania numerycznego użyłem najprostszej metody Newtona z odpowiednio małym krokiem. Poniżej prezentuję kody źródłowe tych programów.

1 Dynamika w dwóch wymiarach

Kod programu

```
Program Trajektorja_2D;
uses crt;

const
  DT = 0.00001;

(*-- Plik do zapisu danych --*)
  plik = 'dane.dat';

(*-- Parametry pulapki i ~predkosc obrotu --*)
  Vx = 1;
  Vy = 3;
  Omega = 2;

(*-- Warunki poczatkowe --*)
  x0 = 5;
  y0 = 0;
  px0 = 0;
  py0 = 5;

var
  x,y,px,py : real;
```

```

x2,y2,px2,py2 : real;
f : text;

begin
  x:=x0; y:=y0; px:=px0; py:=py0;
  assign(f,plik);
  rewrite(f);
  repeat
    px2:=px+(-Vx*x+Omega*py)*DT;
    py2:=py+(-Vy*y-Omega*px)*DT;
    x2:=x+(px+Omega*y)*DT;
    y2:=y+(py-Omega*x)*DT;
    if ((round(x2*50)<>round(x*50))or
        (round(y2*50)<>round(y*50)))
    then writeln(f,x2,' ',y2);
    x:=x2; y:=y2; px:=px2; py:=py2;
  until keypressed;
  readkey;
  close(f);
end.

```

2 Dynamika w trzech wymiarach

Kod programu

```

Program Trajektorja_3D;
uses crt;

const
  DT = 0.0001;

(*-- Plik do zapisu danych --*)
plik = 'dane.dat';

(*-- Parametry pulapki i~predkosc obrotu --*)
Vx = 1;
Vy = 2;
Vz = 3;
Omega = 0;

(*-- Warunki poczatkowe --*)
x0 = 5;
y0 = 0;
z0 = 0;

```



```

Vx0 = 0;
Vy0 = 5;
Vz0 = 0;

var
  x,y,z,wx,wy,wz,Ax,Ay,Az : real;
  x2,y2,z2 : real;
  dVx,dVy,dVz,dx,dy,dz : real;
  a,T : real;
  f : text;

begin
  x:=x0; y:=y0; z:=z0; wx:=Vx0; wy:=Vy0; wz:=Vz0;
  x2:=1000; y2:=1000; z2:=1000;
  T:=0;
  assign(f,plik);
  rewrite(f);
  repeat
    a:=Omega*T;
    AX:=-x*cos(a)*cos(a)*Vx-1/2*x*Vy+1/2*x*Vy*cos(a)*cos(a)
      -1/2*x*Vz+1/2*x*Vz*cos(a)*cos(a)-1/2*y*sqrt(2)*sin(a)*
      cos(a)*Vx+1/4*y*sqrt(2)*sin(a)*cos(a)*Vy+1/4*y*sqrt(2)*
      sin(a)*cos(a)*Vz+1/4*y*sqrt(2)*sin(a)*Vy-1/4*y*sqrt(2)*
      sin(a)*Vz-1/2*z*sqrt(2)*sin(a)*cos(a)*Vx+1/4*z*sqrt(2)*
      sin(a)*cos(a)*Vy+1/4*z*sqrt(2)*sin(a)*cos(a)*Vz-1/4*z*
      sqrt(2)*sin(a)*Vy+1/4*z*sqrt(2)*sin(a)*Vz;
    AY:=-1/2*sqrt(2)*x*sin(a)*cos(a)*Vx+1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*
      cos(a)*Vy+1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*cos(a)*Vz+1/4*sqrt(2)*x*
      sin(a)*Vy-1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*Vz-1/2*y*Vx+1/2*y*Vx*
      cos(a)*cos(a)-1/4*y*Vy*cos(a)*cos(a)-1/4*y*Vz*cos(a)*
      cos(a)-1/2*y*cos(a)*Vy+1/2*y*cos(a)*Vz-1/4*y*Vy-1/4*y*
      Vz-1/2*z*Vx+1/2*z*Vx*cos(a)*cos(a)-1/4*z*Vy*cos(a)*
      cos(a)-1/4*z*Vz*cos(a)*cos(a)+1/4*z*Vy+1/4*z*Vz;
    AZ:=-1/2*sqrt(2)*x*sin(a)*cos(a)*Vx+1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*
      cos(a)*Vy+1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*cos(a)*Vz-1/4*sqrt(2)*
      x*sin(a)*Vy+1/4*sqrt(2)*x*sin(a)*Vz-1/2*y*Vx+1/2*y*Vx*
      cos(a)*cos(a)-1/4*y*Vy*cos(a)*cos(a)-1/4*y*Vz*cos(a)*
      cos(a)+1/4*y*Vy+1/4*y*Vz-1/2*z*Vx+1/2*z*Vx*cos(a)*
      cos(a)-1/4*z*Vy*cos(a)*cos(a)-1/4*z*Vz*cos(a)*cos(a)+
      1/2*z*cos(a)*Vy-1/2*z*cos(a)*Vz-1/4*z*Vy-1/4*z*Vz;
    dVx:=AX*DT;
    dVy:=AY*DT;
    dVz:=AZ*DT;
  until false;
end

```

```

dx:=wx*DT;
dy:=wy*DT;
dz:=wz*DT;
T:=T+DT;
wx:=wx+dVx;
wy:=wy+dVy;
wz:=wz+dVz;
x:=x+dx;
y:=y+dy;
z:=z+dz;
if ((round(x2*10)<>round(x*10))or
    (round(y2*10)<>round(y*10))or
    (round(z2*10)<>round(z*10))) then
begin
  writeln(f,x,' ',y,' ',z);
  x2:=x; y2:=y; z2:=z;
end;
until keypressed;
readkey;
close(f);
end.

```

3 Dynamika z uwzględnieniem grawitacji

Kod programu

```

Program Trajektorja_Grawit;
uses crt;

const
  DT = 0.00001;

(*-- Plik do zapisu danych --*)
plik = 'dane.dat';

(*-- Parametry pulapki i ~predkosc obrotu --*)
Vx = 1;
Vy = 3;
Omega = 2;

(*-- Warunki poczatkowe --*)
x0 = 5;
y0 = 0;
px0 = 0;

```

```
py0 = 5;

(*-- Przyspieszenie grawitacyjne --*)
g = 2;

var
  x,y,px,py : real;
  x2,y2,px2,py2 : real;
  T : real;
  f : text;

begin
  x:=x0; y:=y0; px:=px0; py:=py0; T:=0;
  assign(f,'dane1.txt');
  rewrite(f);
  repeat
    px2:=px+(-Vx*x+Omega*py-g*sin(Omega*T))*DT;
    py2:=py+(-Vy*y-Omega*px-g*cos(Omega*T))*DT;
    x2:=x+(px+Omega*y)*DT;
    y2:=y+(py-Omega*x)*DT;
    if ((round(x2*50)<>round(x*50))or
        (round(y2*50)<>round(y*50)))
    then writeln(f,x2,' ',y2);
    x:=x2; y:=y2; px:=px2; py:=py2; T:=T+DT;
  until keypressed;
  close(f);
end.
```


Dodatek C

Twierdzenia matematyczne

W niniejszym dodatku podaję twierdzenia matematyczne z dowodami, do których odwołuję się w tekście.

1 Macierzowe równanie Riccatiego

Definicja

Różniczkowym macierzowym n -wymiarowym równaniem Riccatiego nazywamy równanie postaci:

$$\frac{d\hat{K}(t)}{dt} = \alpha\hat{K}^2(t) + \hat{K}(t)\cdot\hat{W} + \hat{W}^T\cdot\hat{K}(t) + \hat{U}, \quad (\text{C.1})$$

gdzie \hat{W} i \hat{U} są niezależnymi od czasu macierzami $n \times n$ i α niezależnym od czasu współczynnikiem liczbowym.

Twierdzenie

$\hat{K}(t)$ jest rozwiązaniem różniczkowego macierzowego równania Riccatiego (C.1) wtedy i tylko wtedy gdy istnieją macierze $\hat{A}(t)$ i nieosobliwa $\hat{B}(t)$ spełniające układ równań:

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \hat{U}\cdot\hat{B}(t) + \hat{W}^T\cdot\hat{A}(t), \quad (\text{C.2a})$$

$$\frac{d\hat{B}(t)}{dt} = -\alpha\hat{A}(t) - \hat{W}\cdot\hat{B}(t). \quad (\text{C.2b})$$

i wtedy rozwiązanie ma postać:

$$\hat{K}(t) = \hat{A}(t)\cdot\hat{B}^{-1}(t). \quad (\text{C.3})$$

Dowód

\Leftarrow Załóżmy, że istnieją macierze \hat{A} i \hat{B} spełniające układ równań (C.2). Wykorzystując oczywisty fakt, że:

$$\frac{d}{dt}(\hat{B}^{-1}) = -\hat{B}^{-1} \cdot \frac{d\hat{B}}{dt} \cdot \hat{B}^{-1} \quad (\text{C.4})$$

i podstawiając do wzoru (C.3) założone zależności (C.2) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{K}(t)}{dt} &= \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \cdot \hat{B}^{-1} - \hat{A} \cdot \hat{B}^{-1} \cdot \frac{d\hat{B}(t)}{dt} \cdot \hat{B}^{-1} = \\ &= \hat{U} \cdot \hat{B} \cdot \hat{B}^{-1} + \hat{W}^T \cdot \hat{A} \cdot \hat{B}^{-1} + \alpha \hat{A} \cdot \hat{B}^{-1} \cdot \hat{A} \cdot \hat{B}^{-1} + \hat{A} \cdot \hat{B}^{-1} \cdot \hat{W} \cdot \hat{B} \cdot \hat{B}^{-1} = \\ &= \alpha \hat{K}^2(t) + \hat{K}(t) \cdot \hat{W} + \hat{W}^T \cdot \hat{K}(t) + \hat{U}. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Zatem tak zdefiniowana macierz \hat{K} spełnia różniczkowe macierzowe równanie Riccatiego (C.1).

\Rightarrow Załóżmy, że istnieje macierz $\hat{K}(t)$ spełniająca różniczkowe równanie Riccatiego (C.1). Zdefiniujmy następujące macierze:

$$\hat{B}(t) = \text{T exp} \left[- \int_0^t (\alpha \hat{K}(\tau) + \hat{W}) d\tau \right], \quad (\text{C.6a})$$

$$\hat{A}(t) = \hat{K}(t) \cdot \hat{B}(t). \quad (\text{C.6b})$$

Obliczając pochodne po czasie tak zdefiniowanych macierzy otrzymujemy:

$$\frac{d\hat{B}(t)}{dt} = -(\alpha \hat{K}(t) + \hat{W}) \cdot \hat{B}(t) = -\alpha \hat{A}(t) - \hat{W} \cdot \hat{B}(t), \quad (\text{C.7a})$$

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}(t)}{dt} &= \frac{d\hat{K}(t)}{dt} \cdot \hat{B}(t) + \hat{K}(t) \cdot \frac{d\hat{B}(t)}{dt} = \\ &= \left(\alpha \hat{K}^2(t) + \hat{K}(t) \cdot \hat{W} + \hat{W}^T \cdot \hat{K}(t) + \hat{U} \right) \cdot \hat{B}(t) + \\ &\quad - \hat{K}(t) \left(\alpha \hat{K}(t) + \hat{W} \right) \cdot \hat{B}(t) \\ &= \hat{U} \cdot \hat{B}(t) + \hat{W}^T \cdot \hat{K}(t) \cdot \hat{B}(t) = \hat{U} \cdot \hat{B}(t) + \hat{W}^T \cdot \hat{A}(t). \end{aligned} \quad (\text{C.7b})$$

Zatem rzeczywiście tak zdefiniowane macierze \hat{A} i \hat{B} spełniają układ równań (C.2). Równocześnie równanie (C.6b) jest równoważne równaniu (C.3). Zatem każde rozwiązanie równania Riccatiego daje się przedstawić w postaci (C.3). \square

Obserwacja

Wybierając w niniejszych rozważaniach $\alpha = -i$, $\hat{U} = i\hat{V}$, $\hat{W} = \hat{\Omega}$, $\hat{A} = -i\hat{N}$, $\hat{B} = m\hat{D}$ otrzymujemy rozważania podane w punkcie 1.2 w rozdziale 5.

2 Wartości własne pewnej macierzy

Twierdzenie

Niech macierze \hat{W} , \hat{A} , \hat{B} będą macierzami rzeczywistymi $n \times n$. Niech \hat{A} i \hat{B} będą dodatkowo macierzami symetrycznymi. Niech macierz $\hat{\mathcal{M}}$ będzie macierzą $2n \times 2n$ postaci:

$$\hat{\mathcal{M}} = \begin{pmatrix} \hat{W} & \hat{A} \\ \hat{B} & \hat{W}^T \end{pmatrix}. \quad (\text{C.8})$$

Wtedy jeśli λ jest wartością własną tej macierzy, to $-\lambda$ też jest jej wartością własną.

Dowód

Zauważmy, że zachodzi następująca transformacja podobieństwa:

$$-\hat{\mathcal{M}}^T = \hat{\mathcal{S}} \cdot \hat{\mathcal{M}} \cdot \hat{\mathcal{S}}^{-1}, \quad (\text{C.9})$$

gdzie macierz podobieństwa jest postaci (\hat{I} jest macierzą jednostkową $n \times n$):

$$\hat{\mathcal{S}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{I} \\ -\hat{I} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.10})$$

Ponieważ macierze połączone transformacją podobieństwa mają te same wartości własne, to jeśli λ jest wartością własną macierzy $\hat{\mathcal{M}}$ to jest ona również wartością własną macierzy $-\hat{\mathcal{M}}^T$. Z drugiej strony operacja transpozycji również nie zmienia wartości własnych. Stąd wynika, że λ musi być również wartością własną macierzy $-\hat{\mathcal{M}}$. Jednak macierz przeciwna ma dokładnie przeciwne wartości własne. Zatem macierz $\hat{\mathcal{M}}$ musi mieć również wartość własną $-\lambda$. \square

Obserwacja

Wybierając w niniejszych rozważaniach $\hat{W} = \hat{\Omega}$, $\hat{A} = \frac{1}{m}\hat{I}$, $\hat{B} = -m\hat{V}$ otrzymujemy wnioski podane w punkcie 2 rozdziału 5.

3 Układ równań (6.20)

W punkcie 3.2. w rozdziale 6. wykorzystaliśmy fakt, że następujący układ równań:

$$0 = \beta_1 \alpha_1 + \alpha(\beta + \Omega), \quad (\text{C.11a})$$

$$0 = \beta_2 \alpha_2 + \alpha(\beta - \Omega), \quad (\text{C.11b})$$

$$0 = (\beta_1 + \beta_2)\alpha + \beta(\alpha_1 + \alpha_2) + \Omega(\alpha_2 - \alpha_1), \quad (\text{C.11c})$$

$$0 = \beta^2 + \beta_1^2 - \alpha^2 - \alpha_1^2 + 2b\alpha_1 + V_x + 2\Omega\beta, \quad (\text{C.11d})$$

$$0 = \beta^2 + \beta_2^2 - \alpha^2 - \alpha_2^2 + 2b\alpha_2 + V_y - 2\Omega\beta, \quad (\text{C.11e})$$

$$0 = (2b - \alpha_1 - \alpha_2)\alpha + \Omega(\beta_2 - \beta_1) + \beta(\beta_1 + \beta_2) \quad (\text{C.11f})$$

ma rozwiązania dla pułapki niesymetrycznej ($V_x \neq V_y$) tylko wtedy, gdy zachodzi związek $\beta_1 = \beta_2 = \alpha = 0$. Udowodnijmy teraz ten fakt.

Po pierwsze zauważmy, że równania (C.11a), (C.11b) i C.11c) stanowią układ trzech równań liniowych na parametry β , β_1 i β_2 . Łatwo sprawdzić, że są one równe:

$$\beta = \frac{\Omega(\alpha_1 - \alpha_2)}{\alpha_1 + \alpha_2}, \quad \beta_1 = -\frac{2\alpha\Omega}{\alpha_1 + \alpha_2}, \quad \beta_2 = \frac{2\alpha\Omega}{\alpha_1 + \alpha_2}. \quad (\text{C.12})$$

Stąd otrzymujemy natychmiastowy wniosek, że $\beta_1 + \beta_2 = 0$. Wstawiając wyliczone wielkości (C.12) do równania (C.11f) otrzymujemy warunek:

$$\alpha \left[2b - (\alpha_1 + \alpha_2) + \frac{4\Omega^2}{\alpha_1 + \alpha_2} \right] = 0. \quad (\text{C.13})$$

Z drugiej strony jednak, odejmując równanie (C.11e) od równania (C.11d) otrzymujemy:

$$-\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + 2b(\alpha_1 - \alpha_2) + V_x - V_y + 4\Omega\beta = 0. \quad (\text{C.14})$$

Co, po wykorzystaniu wzorów (C.12), prowadzi do związku:

$$(\alpha_1 - \alpha_2) \left[2b - (\alpha_1 + \alpha_2) + \frac{4\Omega^2}{\alpha_1 + \alpha_2} \right] + V_x - V_y = 0. \quad (\text{C.15})$$

Stąd widać natychmiast, że jeśli tylko pułpka jest niesymetryczna, tzn. $V_x \neq V_y$, to muszą być spełnione zawsze następujące nierówności:

$$\alpha_1 - \alpha_2 \neq 0, \quad (\text{C.16a})$$

$$2b - (\alpha_1 + \alpha_2) + \frac{4\Omega^2}{\alpha_1 + \alpha_2} \neq 0. \quad (\text{C.16b})$$

Nierówność (C.16b) oznacza jednak, że jedynym sposobem na spełnienie równania (C.13) jest warunek $\alpha = 0$. To pociąga za sobą, ze względu na równania (C.12), dodatkowy warunek $\beta_1 = \beta_2 = 0$.

□

Bibliografia

- [1] I. Białynicki-Birula and T. Sowiński, *Gravity-induced resonances in a rotating trap*, Phys. Rev. a **71**, 1 (2005).
- [2] I. Białynicki-Birula and T. Sowiński, *Solutions of the Logarithmic Schrödinger Equation in a Rotating Harmonic Trap*, Nonlinear Waves: Classical and Quantum Aspects, F. Kh. Abdullaev and V. V. Konotop (eds.), Kluwer, Amsterdam (2004), p. 99.
- [3] T. Sowiński and I. Białynicki-Birula, *Harmonic oscillator in a rotating trap: Complete solution in 3D*, **quant-ph/0409070**.
- [4] E. T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge University Press, Cambridge, 1904 (Reprinted by Dover in 1944), p. 207.
- [5] L. D. Landau, E. M. Lifszyc, *Mechanika*, Wydawnictwo Naukowe PWN, (1966).
- [6] L. D. Landau, E. M. Lifszyc, *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna*, Wydawnictwo Naukowe PWN, (1979).
- [7] I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński, *Teoria kwantów. Mechanika falowa*, Wydawnictwo Naukowe PWN, (2001).
- [8] W. T. Reid, *Riccati Differential Equations*, Academic Press, New York, (1972).
- [9] G. C. Goodwin, S. F. Graebe, and M. E. Salgado, *Control System Design*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Mass. (2001), Appendix D.
- [10] M. Linn, M. Niemeyer, and A. L. Fetter, *Vortex stabilization in a small rotating asymmetric Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. a **64**, 023602 (2001).
- [11] M. Ö. Oktel, Phys. Rev. A, *Vortex lattice of a Bose-Einstein condensate in a rotating anisotropic trap*, **69**, 023618 (2004).
- [12] D. Guéry-Odelin, *Spinning up and down a Boltzmann gas*, Phys. Rev. a **62**, 033607 (2000).
- [13] A. Recati, F. Zambelli, and S. Stringari, *Overcritical Rotation of a Trapped Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **86**, 377 (2001).

-
- [14] P. Rosenbusch, D. S. Petrov, S. Sinha, F. Chevy, V. Bretin, Y. Castin, G. Shlyapnikov, and J. Dalibard, *Critical Rotation of a Harmonically Trapped Bose Gas*, Phys. Rev. Lett. **88**, 250403-1 (2002).
- [15] D. Guéry-Odelin and S. Stringari, *Scissors Mode and Superfluidity of a Trapped Bose-Einstein Condensed Gas*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4452 (1999).
- [16] O. M. Maragó, S. A. Hopkins, J. Arlt, E. Hodby, G. Hechenblaikner, and C. J. Foot, *Observation of the Scissors Mode and Evidence for Superfluidity of a Trapped Bose-Einstein Condensed Gas*, Phys. Rev. Lett. **84**, 2056 (2000).
- [17] N. L. Smith, W. H. Heathcote, J. M. Krueger, and C. J. Foot, *Experimental Observation of the Tilting Mode of an Array of Vortices in a Dilute Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **93**, 080406 (2004).
- [18] I. Białynicki-Birula and Z. Białynicka-Birula, *Center-of-mass motion in the many-body theory of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. a **65**, 063606 (2002).
- [19] J. Arnaud, *Pulsating Gaussian wavepackets and complex trajectories*, Eur. J. Phys. **21**, L15-L16 (2000).
- [20] A. S. de Castro and N. C. da Cruz, *A pulsating Gaussian wave packet*, Eur. J. Phys. **20**, L19-L20 (1999).
- [21] I. Białynicki-Birula, *Beyond the coherent states: Gaussons of the electromagnetic field*, in Cooperation and Fluctuations, Eds. F. Haake, L. M. Narducci and D. F. Walls, Cambridge University Press, Cambridge (1986), p. 159.
- [22] P. Lancaster, *The role of the hamiltonian in the solution of algebraic Riccati equations*, Progr. Systems Control Theory, Integral Equations and Operator Theory, Vol. **25**, Birkhäuser (1999), pages 157-172.
- [23] L. P. Pitaevskii, Zk. Eksp. Teor. Fiz **40**, 646 (1961).
- [24] E. P. Gross, *Hydrodynamics of a Superfluid Condensate*, J. Math. Phys. **4**, 195 (1963).
- [25] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases* **cond-mat/9806038**.
- [26] I. Białynicki-Birula and J. Mycielski, *Nonlinear wave mechanics*, Ann. of Phys. (N.Y.), **100**, 62 (1976).
- [27] I. Białynicki-Birula and J. Mycielski, *Gaussons: Solitons of the logarithmic Schrödinger equation*, Physica Scripta, **20**, 539 (1978).

