

Emilia Witkowska

**Metoda pól klasycznych
w opisie gazu bozonowego w równowadze
termodynamicznej**

Praca doktorska napisana
pod kierunkiem doc. dr hab. Mariusza Gajdy

Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk

Warszawa 2007

Spis treści

Streszczenie	iii
1 Wprowadzenie	1
1.1 Co to jest kondensat Bosego-Einsteina?	3
1.2 Metoda Bogoliubowa	3
1.3 Metoda pól klasycznych	9
2 Kwantowanie drgań nieliniowej struny	13
2.1 Dynamika nieliniowej struny	13
2.2 Stan równowagi termodynamicznej	15
2.3 Elementarne wzbudzenia: fonony	18
3 Dynamika fazy kondensatu Bosego-Einsteina	24
3.1 Klasyczne pole na sieci: model	24
3.2 Implementacja numeryczna	26
3.3 Metoda pól klasycznych: wyniki symulacji numerycznych	27
3.4 Metoda Bogoliubowa: wyniki rachunków analitycznych	30
3.4.1 Funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie	31
3.4.2 Dynamika wariacji fazy kondensatu	40
4 Naładowane nieliniowe pole Kleina-Gordona	46
4.1 Model	46
4.2 Metoda Bogoliubowa: opis w temperaturze zerowej	49
4.2.1 Widmo elementarnych wzbudzeń	50
4.2.2 Operator pola	51
4.2.3 Hamiltonian	53
4.2.4 Ładunek	54
4.2.5 Granica pola nieoddziałującego: $\lambda \rightarrow 0$	55
4.2.6 Granica nierelatywistyczna	56
4.3 Metoda pól klasycznych: opis w temperaturze większej od zera	57
4.4 Przybliżenie Bogoliubowa-Popowa	67
4.5 Kondensat Bosego-Einsteina relatywistycznych cząstek	75
5 Podsumowanie wyników	79
Bibliografia	82

Streszczenie

W niniejszej pracy prezentujemy metodę pól klasycznych służącą do opisu kondensatu Bosego-Einsteina w stanie równowagi termodynamicznej. Metoda ta została zaproponowana w pracach [1, 2, 3] i zastosowana do opisu własności kondensatu Bosego-Einsteina. W tej pracy metodę pól klasycznych zastosowaliśmy w dwóch przypadkach: analizie dynamiki fazy kondensatu Bosego-Einsteina, oraz badania dynamiki i właściwości termicznych dodatnio naładowanego pola Kleina-Gordona. W obu przypadkach omówione zostały wyniki symulacji numerycznych wykonanych metodą pól klasycznych, oraz rachunków analitycznych wykonanych w przybliżeniu Bogoliubowa. Proponujemy również fizyczną interpretację, istotnego w metodzie pól klasycznych, parametru obciążenia modów o wysokich energiach.

We **wprowadzeniu** opisujemy podstawowe własności kondensatu Bosego-Einsteina, oraz omawiamy jego definicję zaproponowaną przez Penrosa i Onsagera [4]. Rozważamy dwie metody służące do opisu kondensatu: metodę Bogoliubowa, słuszną w temperaturze $T = 0$, oraz metodę pól klasycznych, będącą uogólnieniem metody Bogoliubowa dla temperatur $T > 0$.

Rozdział drugi poświęcony jest badaniu fizycznego znaczenia parametru obciążenia występującego w metodzie pól klasycznych. Na podstawie analizy własności rzeczywistego pola wychyleń oddziałujących oscylatorów pokazujemy, że parametr obciążenia jest istotnym fizycznym parametrem równoważnym wprowadzeniu stałej Plancka do klasycznej teorii pola.

W **rozdziale trzecim** prezentujemy analizę dynamiki fazy kondensatu Bosego-Einsteina w temperaturze większej od zera. W szczególności, koncentrujemy się na analizie trzech funkcji: wariancji fazy, funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie i funkcji korelacji amplitudy modu o zerowej energii. Wykonaliśmy obliczenia numeryczne oraz rachunki analityczne metodą Bogoliubowa w ramach trzech przybliżeń: *(i)* Bogoliubowa, *(ii)* Bogoliubowa uwzględniającego skończony czas życia kwazicząstek, oraz *(iii)* przybliżenia opierającego się na hipotezie ergodycznej. Pokazaliśmy, że wariancja fazy jest kwadratową funkcją czasu, a czas korelacji liczby atomów w kondensacie jest nieskończony. Przybliżenie Bogoliubowa poprawnie opisuje dynamikę funkcji jedynie dla krótkich czasów, natomiast długoczasowe zachowanie jest poprawnie opisane po założeniu ergodyczności dynamiki. Oznacza to, że zachowanie energii podczas ewolucji układu wprowadza dodatkowe korelacje między amplitudami modów i nie pozwala na znikanie pewnych funkcji korelacji. Obliczyliśmy również zależność temperaturową interesujących nas wielkości,

zarówno metodą pól klasycznych, jak i metodą Bogoliubowa. Wariancja fazy i długoczasowe zachowanie dwuczasewej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie są kwadratowymi funkcjami temperatury. Wyniki rachunków analitycznych w przybliżeniu ergodycznym są w bardzo dobrej zgodności z wynikami symulacji numerycznych w ramach metody pól klasycznych nawet w temperaturach bliskich temperatury krytycznej.

W **rozdziale czwartym** stosujemy metodę pól klasycznych do opisu własności naładowanego nieliniowego pola Kleina-Gordona. Relatywistyczne pole w stanie równowagi termodynamicznej badamy numerycznie oraz analitycznie w ramach przeprowadzonej do tego celu procedury Bogoliubowa. Pokazaliśmy, że dla energii rzędu masy spoczynkowej następuje makroskopowe gromadzenie się ładunku w stanie o najniższej energii – powstaje kondensat Bosego–Einsteina. Analizując widmo amplitud wykazaliśmy, że w układzie istnieją dwa typy wzbudzeń: fononowe, których relacja dyspersyjna jest liniowa dla małych pędów, oraz wzbudzenia charakteryzowane przez kwadratową relację dyspersyjną dla małych pędów. W przybliżeniu Bogoliubowa obliczyliśmy energie tych wzbudzeń oraz zdiagnozowaliśmy hamiltonian i ładunek. Sprawdziliśmy, że wielkości te mają poprawną granicę pola nieoddziałującego i właściwą granicę nierelatywistyczną. Numerycznie badaliśmy zależność od temperatury potencjału chemicznego, ładunku cząstek, ładunku zgromadzonego w modzie o zerowej energii oraz jego fluktuacje. Pokazaliśmy, że potencjał chemiczny jest taki sam dla cząstek i antycząstek, i jest rosnącą funkcją temperatury. Wykazaliśmy również, że ładunek cząstek zmienia się pod wpływem oddziaływania i temperatury, podczas gdy ładunek antycząstek jest taki sam jak w przypadku nieoddziałującym.

Główne wyniki pracy zostały podsumowane w **rozdziale piątym**.

1 Wprowadzenie

W roku 1925 Albert Einstein przewidział istnienie przejścia fazowego w doskonałym gazie atomów podlegających statystyce, która teraz nosi nazwę statystyki Bosego–Einsteina [5]. Owe przejście fazowe charakteryzuje się tym, że poniżej pewnej krytycznej wartości temperatury T_c przeważająca część identycznych i nieoddziałujących atomów, gromadzi się (kondensuje) w stanie o najniższej energii. Stan podstawowy zostaje makroskopowo obsadzony nawet gdy temperatura atomów jest wystarczająca do obsadzania stanów o wyższej energii. Przejście fazowe zachodzi wówczas, gdy termiczna długość fali de Broglie’a $\lambda_{dB} = 2\pi\hbar^2/mk_B T$ jest porównywalna ze średnią odległością między atomami $r = \rho^{-1/3}$ (\hbar jest stałą Plancka, m masą atomów, k_B stałą Boltzmann, T temperaturą, a ρ gęstością atomów).

Termiczna długość fali de Broglie’a zależy od temperatury: im niższa temperatura, tym długość fali jest większa. W trakcie obniżania temperatury długość fali rośnie i staje się większa od odległości między atomami. Wtedy poszczególne fale zaczynają na siebie nachodzić i nierozróżnialność cząstek staje się istotna, atomy tracą swą indywidualność. W dobrze określonej temperaturze układ atomów ulega przemianie fazowej – tworzy się kondensat.

Wykorzystując idee zawarte w pracach Bosego [6] Einstein przewidział zjawisko kondensacji jeszcze przed odkryciem różnicy między bozonami i fermionami. Einstein traktował kondensację bozonów raczej jako ciekawostkę, a współcześni mu uznali zjawisko za niemożliwe do zaobserwowania w laboratorium. Przez dość długi czas uważano, że zanim układ atomów ulegnie omawianej przemianie fazowej, oddziaływania zawsze doprowadzą do przejścia w fazę stałą. Jedynym kontrprzykładem był nadciekły hel. Fenomen kondensatu Bosego–Einsteina ciekawił jednak naukowców, a jego teoria była rozwijana m.in. przez Londona, Tiszę, Landaua, Bogoliubowa, Penrosa, Onsagera, Feynmana. Wyzwaniem dla fizyków było stworzenie układu atomowego, który pozostałby gazem w temperaturze kondensacji. Istotne było wyeliminowanie zderzeń trójciałowych, które prowadzą do tworzenia cząsteczek lub klastrów atomowych i sprzyjają przejściu w fazę stałą. Dla gazów o gęstościach rzędu 10^{14} atomów/cm³ kondensat pojawia się w zakresie temperatur od setek nano kelwinów do kilku mikro kelwinów. Stąd też wieloletnie prace nad technikami ochładzania oraz pułapkowania atomów.

Potrzeba było 70-ciu lat badań, zarówno doświadczalnych jak i teoretycznych, aby zrealizować układ, który potwierdził przewidywania teorii Einsteina. Po raz pierwszy zjawisko kondensacji Bosego–Einsteina w rozrzedzonym gazie

atomowym zaobserwowano prawie jednocześnie w dwóch grupach naukowych w 1995 roku [7, 8]. Od tego czasu doświadczalnie zbadano podstawowe własności kondensatu, przede wszystkim zmierzono frakcję skondensowaną w funkcji temperatury [9] i potwierdzono przewidywania fizyki statystycznej.

W większości doświadczeń stan zwyrodnienia kwantowego osiąga się w temperaturach ok. 500 nK do $2 \mu\text{K}$ przy koncentracji rzędu 10^{14} lub 10^{15} atomów/cm³. Atomy, które zastosowano w doświadczeniach to m.in. rubid, sód, potas, lit, chrom, hel, wodór. Największe kondensaty zawierają ok. 100 milionów atomów (w sodzie) lub nawet miliard (w wodorze), najmniejsze z nich zaś kilkaset. Kształt i wielkość chmurze atomów nadaje pułapka magnetyczna, a także oddziaływania. Kondensaty mogą być kuliste (sferycznie symetryczne), albo o kształcie cygara lub dysku. Cały cykl chłodzenia aż do otrzymania kondensatu, może trwać od kilku sekund do kilku minut.

Wykonano szereg doświadczeń, które pokazały falową naturę kondensatu. Przykładem może być eksperyment analogiczny do doświadczenia Younga, lub eksperyment pokazujący interferencję dwóch kondensatów [10, 11]. Zaobserwowano szereg zjawisk znanych z optyki nieliniowej, takich jak: ciemne solitony [12], solitony jasne [13], czy też mieszanie czterech fal [14]. Zaobserwowano również efekt Josephsona [15]. Nauczono się kontrolować siłę oddziaływania pomiędzy atomami za pomocą rezonansów Feshbacha, umieszczono kondensat w sieci optycznej, uzyskano kondensat molekularny i zaobserwowano kondensat par Coopera. Wymieniliśmy nieliczne przykłady realizowanych doświadczeń, które obrazują różnorodność i bogactwo zjawisk fizyki układu zimnych atomów.

Doświadczalna realizacja kondensatu Bosego-Einsteina różni się dość znacznie od pierwotnej idei Einsteina. Einstein przeprowadził rachunki dla gazu doskonałego w granicy termodynamicznej. W eksperymencie skończona liczba atomów znajduje się w ograniczonej przestrzeni i czuje dodatkowe siły np. związane z potencjałem pułapki, ponadto atomy oddziałują ze sobą. Oddziaływanie jest wręcz niezbędne do efektywnego chłodzenia. Dlatego też, w celu prawidłowego zrozumienia i opisu realizowanych doświadczeń należy stosować teorię, która uwzględnia ograniczenia nakładane przez eksperyment.

Teoria opisu zdegenerowanego i oddziałującego gazu Bosego znana już była w latach 50-tych. W zerowej temperaturze standartowy opis oparty jest na metodzie Bogoliubowa. W ostatnich latach zaproponowano rozwinięcie tej metody do opisu kondensatu w temperaturze większej od zera, jest to tzw. metoda pól klasycznych [1, 2, 3]. Obie metody w sposób fenomenologiczny zostaną omówione w tym rozdziale, zanim jednak do tego przejdziemy rozpatrzmy definicję kondensatu w języku kwantowej teorii pola.

1.1 Co to jest kondensat Bosego-Einsteina?

Definicja kondensatu Bosego-Einsteina dla układu N oddziałujących bozonów została zaproponowana przez Penrosa i Onsagera [4]. Aby uogólnić koncepcję makroskopowo obsadzonego stanu autorzy rozważyli jednocząstkową macierz gęstości:

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (1.1)$$

gdzie $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ oraz $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ to operatory pola, które odpowiednio kreują oraz anihilują cząstkę w punkcie \mathbf{r} . Operatory te spełniają bozonowe reguły komutacyjne:

$$[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}')] = 0. \quad (1.2)$$

Jednocząstkowa macierz gęstości jest hermitowska oraz dodatnio określona. Można ją zapisać w postaci diagonalnej w bazie ortonormalnych funkcji własnych $f_i(\mathbf{r})$:

$$n^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i N_i f_i^*(\mathbf{r}) f_i(\mathbf{r}'). \quad (1.3)$$

Rzeczywiste wartości własne N_i spełniają warunek normalizacji: $\sum_i N_i = N$, i równe są obsadzeniom jednocząstkowych stanów $f_i(\mathbf{r})$.

Jeżeli jedna z wartości własnych, nazwijmy ją N_0 , jest duża w porównaniu z pozostałymi i w granicy termodynamicznej iloraz N_0/N jest różny od zera, wtedy w układzie istnieje kondensat Bosego-Einsteina. Wówczas stan własny $f_0(\mathbf{r})$ opisuje kondensat, a N_0 jest liczbą atomów w kondensacie.

1.2 Metoda Bogoliubowa

W 1947 roku Bogoliubow zaproponował metodę opisu kondensatu Bosego-Einsteina w temperaturze $T = 0$ [16]. Idea metody Bogoliubowa polega na zastąpieniu operatorów anihilacji cząstek w kondensacie przez zespoloną amplitudę, co prowadzi do opisu w ramach przybliżenia średniego pola. Funkcja falowa kondensatu (parametr porządku) spełnia równanie Grossa-Pitajewskiego. W szczególności, dla jednorodnego gazu Bogoliubow zaproponował metodę diagonalizacji hamiltonianu używając liniowej kombinacji operatorów kreacji i anihilacji atomów. Owa kombinacja znana jest jako transformacja Bogoliubowa i jest podstawą pojęcia *kwazicząstek* – jednego z najważniejszych pojęć w kwantowej teorii wielu ciał.

Zaprezentowany poniżej opis przybliżenia Bogoliubowa jest raczej fenomenologiczny, co nie oznacza, że nie istnieje bardziej formalne podejście do opisu metody Bogoliubowa np. opisane w pracach [17, 18].

Wygodnie jest wykonać rachunki w formalizmie drugiej kwantyzacji. Hamiltonian układu N oddziałujących bozonów znajdujących się w potencjale sześciennego pudła o krawędzi L z nałożonymi periodycznymi warunkami brzegowymi ma postać:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{H}_0 \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.4)$$

gdzie $\hat{H}_0 = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$ jest operatorem energii kinetycznej, a $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ potencjałem oddziaływania dwuciałowego. $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ oraz $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ są operatorami pola, które odpowiednio kreują oraz anihilują cząstkę w punkcie \mathbf{r} , i spełniają bozonowe reguły komutacyjne (1.2). Operator całkowitej liczby atomów ma następującą postać:

$$\hat{N} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (1.5)$$

Potencjał oddziaływania dwuciałowego $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ może mieć dość skomplikowaną formę. W przypadku bardzo zimnych i silnie rozrzedzonych gazów atomowych tylko zderzenia centralne są istotne, niezależnie od szczegółów dwuatomowego potencjału. Zderzenia te charakteryzuje jeden parametr a – długość rozpraszania fali typu s . Precyzując, pojęcie silnie rozrzedzonego gazu oznacza, że liczba atomów w 'objętości rozpraszania' jest znikoma: $\bar{n}|a|^3 \ll 1$, gdzie \bar{n} jest średnią gęstością atomów. Atomy stosowane w doświadczeniach mają długość rozpraszania rzędu nanometrów¹, a gęstość chmur atomowych mieści się w granicach $10^{14} - 10^{15}$ atomów/cm³. Zatem, w większości wykonywanych obecnie doświadczeń $\bar{n}|a|^3$ jest zawsze mniejsze niż 10^{-4} . Warto zauważyć, że warunek $\bar{n}|a|^3 \ll 1$ jest spełniony nie tylko dla małych gęstości, ale również w przypadku słabych oddziaływań i dużych gęstości.

Wobec powyższych rozważań, w niskich energiach, kiedy długość fali de Broglie'a jest bardzo duża, potencjał oddziaływania między atomami możemy przybliżyć przez potencjał o zerowym zasięgu:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.6)$$

gdzie $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ jest stałą sprzężenia. Dla dodatnich wartości a potencjał modeluje oddziaływanie 'efektywnie' odpychające i 'efektywnie' przyciągające dla ujemnych wartości a .

W przybliżeniu Bogoliubowa operator pola $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ zapisujemy w postaci sumy:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

¹np. dla sodu ²³Na długość rozpraszania fali typu s wynosi $a = 2.75\text{nm}$, a dla rubidu ⁸⁷Rb jest równa $a = 5.77\text{nm}$,

Pierwszy wyraz oznacza zespoloną funkcję kondensatu, a drugi jest operatorem opisującym nieskondensowane atomy. Zakładamy, że znaczna część atomów znajduje się w kondensacie, wtedy $\Phi(\mathbf{r})$ jest duże i $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ możemy traktować jako zaburzenie.

Równanie Heisenberga $i\hbar\partial_t\hat{\Psi} = [\hat{\Psi}, \hat{H}]$, po opuszczeniu wyrazów zawierających $\delta\hat{\Psi}$ wyznacza ewolucję czasową funkcji kondensatu:

$$i\hbar\partial_t\Phi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + g|\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (1.8)$$

To nieliniowe równanie Schrödingera w teorii zimnych gazów atomowych nosi nazwę równania Grossa-Pitajewskiego (po raz pierwszy wprowadzone w 1961 roku).

Stacjonarne rozwiązanie równania (1.8) wybieramy w postaci: $\Phi = \Phi_0 \exp(-i\mu t/\hbar)$, gdzie μ jest potencjałem chemicznym. Prowadzi to do następującego równania:

$$\mu\Phi_0(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + g|\Phi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi_0(\mathbf{r}, t). \quad (1.9)$$

Kiedy energia oddziaływania jest znacznie większa niż energia kinetyczna – przybliżenie Thomasa-Fermiego – wtedy można zaniedbać człon z energią kinetyczną i wyznaczyć algebraiczną postać profilu gęstości kondensatu. W obecności zewnętrznego potencjału V_{ext} , profil gęstości kondensatu $|\Phi_0|^2$ ma postać:

$$|\Phi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \approx \frac{\mu - V_{ext}}{g}. \quad (1.10)$$

Powyższy wzór obowiązuje w obszarze, w którym prawa strona jest dodatnia, w przeciwnym wypadku $|\Phi_0|^2 \approx 0$. W typowych eksperymentach profil gęstości jest odwróconą parabolą i przybliżenie Thomasa-Fermiego z V_{ext} będącym potencjałem harmonicznym dobrze go modeluje. Dla jednorodnego gazu z periodycznymi warunkami brzegowymi postać funkcji falowej Φ_0 opisującej kondensat jest szczególnie prosta:

$$\Phi_0 = \sqrt{N/V}, \quad (1.11)$$

gdzie N jest całkowitą liczbą atomów, a potencjał chemiczny jest równy $\mu = g|\Phi_0|^2 = gN/V$.

Rozkładamy operator pola w bazie fal płaskich:

$$\hat{\Psi} = \left(\Phi_0 + \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right) e^{-i\mu t/\hbar}, \quad (1.12)$$

gdzie $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem kreacji cząstki o pędzie $\hbar\mathbf{k}$ spełniającym bozonowe reguły komutacyjne:

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}] = 0. \quad (1.13)$$

Warunek periodyczności pola wyznacza wektor falowy: $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/L$, gdzie $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ i $n_i = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty$.

Równanie Heisenberga po uwzględnieniu wyrazów liniowych w $\delta\hat{\Psi}$ (liniowych w $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$) wyznacza potencjał chemiczny $\mu = gN/V$, oraz równanie na $\hat{a}_{\mathbf{k}}$:

$$i\hbar\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{gN}{V}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{gN}{V}\hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger. \quad (1.14)$$

Zgodnie z kanoniczną transformacją Bogoliubowa $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ jest superpozycją:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar} + v_{-\mathbf{k}}^*\hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar}, \quad (1.15)$$

gdzie $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ są pewnymi funkcjami skalarnymi, zaś $\epsilon_{\mathbf{k}}$ jest energią elementarnych wzbudzeń. Operatory $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ również spełniają bozonowe reguły komutacyjne $[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ jeśli:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.16)$$

$\hat{b}_{\mathbf{k}}$, $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$ są operatorami odpowiednio anihilacji i kreacji kwazicząstek (nazywanych również kwazicząstkami Bogoliubowa).

Wstawiając powyższą postać transformacji do równania (1.14) i porównując wyrazy z taką samą zależnością czasową otrzymujemy:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu\right)u_{\mathbf{k}} + \mu v_{\mathbf{k}}, \quad (1.17)$$

$$-\epsilon_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu\right)v_{\mathbf{k}} + \mu u_{\mathbf{k}}. \quad (1.18)$$

Rozwiązaniem jest $\epsilon_{\mathbf{k}}$ spełniające równanie:

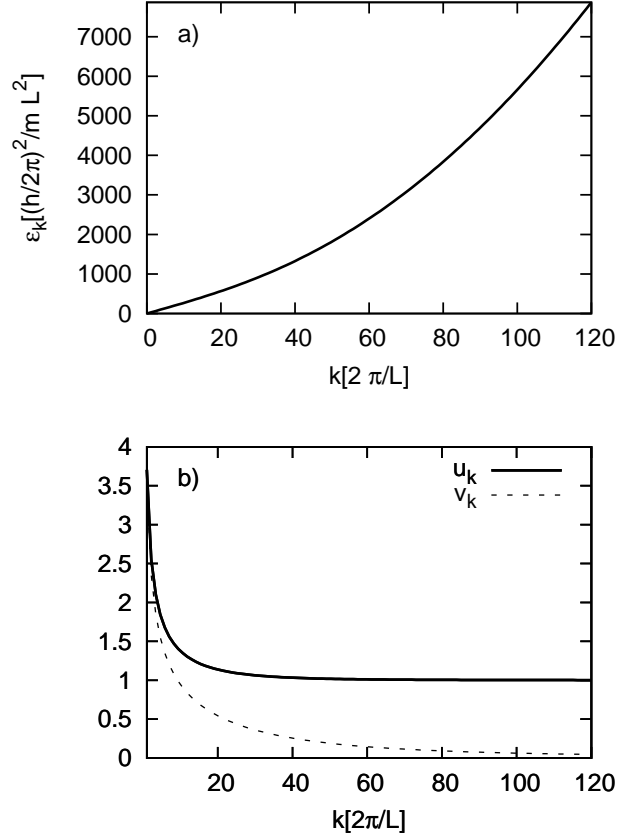
$$\left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}\right)\left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}\right) = \mu^2, \quad (1.19)$$

o postaci:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \left[\left(\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu\right)^2 - \mu^2\right]^{1/2}. \quad (1.20)$$

Na rysunku 1.1a pokazano przykładowe widmo wzbudzeń Bogoliubowa. Warto zauważyć, że dla małych wartości \mathbf{k} energia wzbudzeń kwazicząstek jest liniową funkcją pędu, co jest objawem nadciekłości w układzie. W przypadku dużych \mathbf{k} , energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ jest kwadratową funkcją pędu, dokładnie jak energia cząstki swobodnej.

Funkcje $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ spełniają warunek normalizacji (1.16), a ich iloraz jest dobrze określony przez (1.17) i (1.18). Za pomocą tych dwóch zależności można



Rysunek 1.1: a) energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ wzbudzeń w funkcji wartości wektora falowego $k = |\mathbf{k}|$. Dla małych wartości k energia jest liniowa: $\epsilon_{\mathbf{k}} \approx \hbar|\mathbf{k}|v_s$, gdzie $v_s = \sqrt{\mu/m}$ jest prędkością dźwięku. W granicy dużych \mathbf{k} energia wzbudzeń przyjmuje postać energii cząstki swobodnej $\epsilon_{\mathbf{k}} \approx \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$; b) współczynniki transformacji Bogoliubowa $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$. Dla pędów $\hbar\mathbf{k} \rightarrow 0$ oba współczynniki są tego samego rzędu i dają ten sam wkład do (1.15), natomiast w granicy dużych pędów $v_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, a $u_{\mathbf{k}} \rightarrow 1$. Potencjał chemiczny $\mu = 700\hbar^2/mL^2$.

jednoznacznie wyznaczyć moduły $u_{\mathbf{k}}$ oraz $v_{\mathbf{k}}$:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu} + 1 \right), \quad (1.21)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m} + \mu} - 1 \right), \quad (1.22)$$

i ich wartości $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ znamy z dokładnością do fazy. Na rysunku 1.1b pokazano pędowną zależność rzeczywistych funkcji $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$.

Hamiltonian (1.4) wrażony przez (1.12) posiada wyrazy nie tylko liniowe i kwadratowe, ale również wyższego rzędu w $\hat{a}_{\mathbf{k}}$. Zachowując ten sam rząd rozwinięcia należy ograniczyć się do wyrazów kwadratowych oraz niższego rzędu

w $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, co prowadzi do następującej postaci:

$$\hat{H}^B = \frac{N_0^2 g}{2V} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + 2 \frac{N_0 g}{V} \right) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{N_0 g}{2V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}). \quad (1.23)$$

Hamiltonian ten nazywany jest w literaturze hamiltonianem Bogoliubowa. Pierwszy wyraz oznacza energię N_0 atomów w kondensacie, podczas gdy drugi jest energią niezależnych wzbudzeń, każde o energii $\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m + 2N_0 g / V$. Ostatni wyraz nie zachowuje liczby cząstek. W celu kontrolowania średniej liczby cząstek należy dodać do hamiltonianu wyraz $\mu \hat{N}$, gdzie μ jest potencjałem chemicznym. W ten sposób konstruujemy operator:

$$\hat{F} = \hat{H}^B - \mu \hat{N}, \quad (1.24)$$

gdzie \hat{N} jest operatorem całkowitej liczby atomów:

$$\hat{N} = N_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (1.25)$$

Transformacja Bogoliubowa (1.15) z (1.21) i (1.22) diagonalizuje operator \hat{F} :

$$\hat{F} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \frac{N_0 \mu}{2} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} \right), \quad (1.26)$$

gdzie pierwszy wyraz jest całkowitą energią kwazicząstek i opisuje zespół nieoddziałujących kwazibozonów z energią $\epsilon_{\mathbf{k}}$ każdy. Drugi wyraz jest równy połowie energii cząstek w kondensacie, podczas gdy ostatni wyraz ma wartość nieskończoną ze względu na sumowanie, które rozciąga się od $-\infty$ do $+\infty$. Istnieje również inna wersja opisu przybliżenia Bogoliubowa [19] z potencjałem oddziaływania modelowanym deltą renormalizowaną². Zastosowanie owego potencjału usunęło nieskończoną energię z (1.26), lecz nie wniosło zmian jakościowych i ilościowych do pozostałych wyników omawianych w tej pracy.

Przybliżenie Bogoliubowa jest poprawne w temperaturze zerowej. Jedną z historycznie pierwszych metod opisu kondensatu w skończonej temperaturze jest tzw. teoria Hartree-Focka-Bogoliubowa (HFB) [20]. Struktura równań tej teorii jest podobna do równań Bogoliubowa dla zerowej temperatury. W teorii HFB uwzględniona jest zależna od temperatury gęstość atomów nieskondensowanych oraz tzw. anomalna gęstość, która jest miarą korelacji pomiędzy atomami. Zaniedbując anomalną gęstość otrzymuje się tzw. przybliżenie Popowa [21], w którym spulapkowany gaz jest rozumiany jako kondensat i termiczny gaz atomów. Rachunki w przybliżeniu Bogoliubowa-Popowa wyznaczają wartość potencjału chemicznego:

$$\mu^P = 2 \frac{gN}{V} - \frac{gN_0}{V}, \quad (1.27)$$

² $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rightarrow \delta^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \partial_{r,r}$

oraz widmo wzbudzeń, które w literaturze nazywane jest widmem Bogoliubowa-Popowa:

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^P = \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{gN_0}{V} \right)^2 - \left(\frac{gN_0}{V} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (1.28)$$

Teoria Popowa wyznacza widmo wzbudzeń, które bardzo dobrze zgadzające się z doświadczeniem [22]. Alternatywną do wspomnianej metody opisu termicznych własności kondensatu jest metoda pól klasycznych, która ze względu na prostotę implementacji numerycznej ma dużo szersze możliwości zastosowania.

1.3 Metoda pól klasycznych

Metoda pól klasycznych jest rozwinięciem idei Bogoliubowa na przypadek temperatur większych od zera. O ile w temperaturze zerowej tylko stan o najniższej energii jest makroskopowo obsadzony, to w temperaturach większych od zera zostają makroskopowo obsadzone również inne stany. Dlatego w metodzie pól klasycznych zastępujemy operatory anihilacji i kreacji cząstek przez zespolone amplitudy we wszystkich makroskopowo obsadzonych modach:

$$\hat{\Psi} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rightarrow \Psi = \sum_{\mathbf{k}=-\mathbf{k}_{max}}^{\mathbf{k}_{max}} \psi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}, \quad (1.29)$$

pozostałe mody $|\mathbf{k}| > |\mathbf{k}_{max}|$ są puste i nie są uwzględnione w opisie. W ten sposób wprowadzamy do opisu dodatkowy parametr obcięcia \mathbf{k}_{max} , którego wartość należy dobrze dobrać. W drugim rozdziale niniejszej rozprawy poprzez analizę pola wychyleń oscylatorów oddziałujących nieliniową lokalną siłą, proponujemy fizyczną interpretację parametru obcięcia. Należy zwrócić uwagę, że prezentowane rozumowanie jest dość ogólne, niezależne od oddziaływania i jego rodzaju czy też równań dynamicznych, i dlatego powinno być słuszne dla wszystkich pól bozonowych w przypadku makroskopowego obsadzenia modów. Ze względu na założoną makroskopowość, opis w ramach metody pól klasycznych nie jest słuszny dla pól fermionowych.

Jako przykład rozważmy jednorodny gaz oddziałujących bozonów umieszczonych w potencjale pudła o krawędzi L z periodycznymi warunkami brzegowymi. Układ ten jest szczególnie ze względu na posiadaną symetrię translacyjną. Jednocząstkowa macierz gęstości tego układu jest periodyczna i zależy tylko od różnicy położeń, wówczas jej funkcjami własnymi są fale płaskie. Korzystając z tej własności, bozonowy operator pola rozwijamy w bazie fal

płaskich:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}=-\mathbf{k}_{max}}^{\mathbf{k}_{max}} \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.30)$$

gdzie $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem anihilacji cząstki o pędzie $\hbar\mathbf{k}$ w chwili czasu t , ponadto $\hat{N}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem liczby cząstek o pędzie \mathbf{k} . Równanie Heisenberga wyznaczające ewolucję operatora $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ ma postać:

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2=-\mathbf{k}_{max}}^{\mathbf{k}_{max}} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}. \quad (1.31)$$

Zgodnie z ideą metody pól klasycznych, zastępujemy operatory kreacji i anihilacji cząstek przez zespolone amplitudy: $\hat{a}_{\mathbf{k}} \rightarrow \sqrt{N} \alpha_{\mathbf{k}}$. Pamiętajmy, że taka zamiana jest uzasadniona gdy obsadzenie modu jest duże:

$$N_{\mathbf{k}} = \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle > 1. \quad (1.32)$$

W zerowej temperaturze tylko mod o pędzie $\hbar\mathbf{k} = 0$ spełnia założenie o makroskopowym obsadzeniu modów, więc pozostałe mody muszą zostać pominięte. W temperaturze większej od zera wiele modów może spełniać warunek makroskopowego obsadzenia, i należy je uwzględnić w równaniu (1.30), co prowadzi to do układu równań na amplitudy $\alpha_{\mathbf{k}}$:

$$i\hbar \frac{d\alpha_{\mathbf{k}}}{dt} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \alpha_{\mathbf{k}} + \frac{gN}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2=-\mathbf{k}_{max}}^{\mathbf{k}_{max}} \alpha_{\mathbf{k}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}. \quad (1.33)$$

W reprezentacji położeniowej powyższy układ równań ma postać równania Grossa-Pitajewskiego:

$$i\hbar \partial_t \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + gN |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.34)$$

gdzie rozwiązaniem jest unormowane do jedności pole $\Psi(\mathbf{r}, t)$, które opisuje kondensat Bosego-Einsteina i chmurę termiczną. Równanie Grossa-Pitajewskiego rozwiązywane jest numerycznie. Parametrami kontroli metody pól klasycznych są: stała sprzężenia gN , liczba modów (punktów na sieci lub \mathbf{k}_{max}) oraz całkowita energia. Pozostałe wielkości, takie jak temperatura i liczba atomów, wyznaczone są przez rachunki numeryczne poprzez odpowiedni dobór \mathbf{k}_{max} .

Warto zauważyć, że równanie Grossa-Pitajewskiego ma następującą symetrię: unormowanie pola do dowolnej liczby zmienia jedynie stałą sprzężenia g , własność ta została wykorzystana powyżej. Pole zostało unormowane do jedności i dlatego w równaniu Grossa-Pitajewskiego wyraz nieliniowy jest mnożony

przez N . W wyniku takiego normowania $\alpha_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}}$ reprezentuje frakcję liczby atomów w modzie \mathbf{k} .

Numeryczne rachunki pokazały [1], że układ opisany równaniem (1.34) osiąga stan równowagi. Niezależnie od wybranego stanu początkowego o zadanej energii, dynamika równania Grossa-Pitaiewskiego prowadzi do tego samego stanu równowagi. Analiza rozwiązania równania (1.34) w stanie równowagi wykazała, że energie wzbudzeń opisane są przez formułę Bogoliubowa-Popowa:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + gN_0 \right)^2 - (gN_0)^2 \right]^{1/2}, \quad (1.35)$$

gdzie $N_0 = N \alpha_0^* \alpha_0$ oznacza liczbę atomów w kondensacie.

Istnienie ekwipartycji w układzie: równomiernego rozkładu energii w dostępnych modach wskazuje, że osiągnięty stan jest stanem termicznym. Temperaturę chmury termicznej obliczamy za pomocą relacji ekwipartycji:

$$n_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} = \text{const} = k_B \tilde{T}, \quad (1.36)$$

gdzie k_B jest stałą Boltzmanna. Pamiętać należy, że ze względu na zastosowaną normalizację pola, rachunki numeryczne wyznaczają frakcję liczby atomów $n_{\mathbf{k}} = N_{\mathbf{k}}/N$, oraz temperaturę $\tilde{T} = T/N$ skalowaną przez liczbę cząstek.

Wybór odpowiedniej wartości parametru obciążenia pozwala wyznaczyć nieskalowane wielkości parametrów fizycznych takich jak temperatura i liczba cząstek. Problem ten będzie dyskutowany szczegółowo w rozdziale drugim rozprawy, gdzie podajemy warunek na parametr obciążenia z żądania dopasowania klasycznego rozkładu energii do kwantowego rozkładu energii. Inna metoda dopasowania wartości obsadzenia modu o maksymalnej energii została zaproponowana w [23]. Wykorzystuje ona wynik eksperymentów pokazujących, że temperatura krytyczna gazu oddziałującego jest bliska temperaturze krytycznej gazu doskonałego, różnica wynosi ok. 4.5%. Porównując temperaturę gazu oddziałującego, dla danej frakcji atomów w kondensacie, z temperaturą gazu doskonałego, dla dokładnie tej samej frakcji, można ustalić optymalną wartość obsadzenia modu o najwyższej energii na: $N_{\mathbf{k}_{max}} \approx 0.6 - 0.7$. Jednak w większości zastosowań wartość obsadzenia modu o najwyższej energii jest przymiowana jako $N_{\mathbf{k}_{max}} = 1$, wtedy całkowita liczba atomów jest równa:

$$N = \frac{N_{\mathbf{k}_{max}}}{n_{\mathbf{k}_{max}}} = \frac{1}{n_{\mathbf{k}_{max}}}, \quad (1.37)$$

gdzie $n_{\mathbf{k}_{max}}$ jest wyznaczona numerycznie. Temperatura \tilde{T} jest obliczana na podstawie relacji ekwipartycji (1.36), a jej nieskalowana wartość wynosi $T = \tilde{T}N$.

Zauważmy, że wyniki metody pól klasycznych zależą od przyjętej wartości $N_{\mathbf{k}_{max}}$. Wystarczy, że zmienimy wartość obsadzenia modu o maksymalnej energii z 1 na 2, a temperatura wzrośnie dwukrotnie. Dlatego możemy stwierdzić, że znamy temperaturę i liczbę atomów jedynie z dokładnością do rzędu wielkości. Pomimo tej słabości, metoda pól klasycznych ma wielką zaletę: uwzględnia pełną nieliniową dynamikę pola, dlatego została z sukcesem zastosowana do opisu m.in. dynamiki wirów, fluktuacji fazy czy też spinorowych kondensatów [24].

Metoda pól klasycznych może być użyta w przypadku bardziej złożonym np. gazu atomowego w zewnętrznym potencjale oscylatora harmonicznego, co jest bardziej realistycznym przykładem. Prowadzi to do konieczności diagonalizowania uśrednionej jednocząstkowej macierzy gęstości. Uśrednianie łączy się bezpośrednio z uwzględnieniem realistycznych warunków pomiarowych: skończonej rozdzielczości przestrzennej i czasowej urządzeń pomiarowych. Matematycznie, uśrednianie prowadzi do znikania wyrazów pozadiagonalnych i macierz gęstości przybiera postać:

$$\bar{n}^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} \frac{N_{\mathbf{k}}}{N} f_{\mathbf{k}}^* f_{\mathbf{k}'}. \quad (1.38)$$

Diagonalna forma macierzy gęstości posiada interpretację fizyczną: $N_{\mathbf{k}}$ jest średnim obsadzeniem modu, natomiast $f_{\mathbf{k}}$ jest stanem własnym macierzy gęstości. Liczba atomów i temperatura również obliczane są na podstawie ekwipartycji (1.36) oraz założenia o makroskopowym obsadzeniu modów, np. $N_{\mathbf{k}_{max}} = 1$.

Metoda pól klasycznych została niezależnie zbadana przez wiele grup naukowych, stąd też istnieje szereg wersji jej numerycznej implementacji. Pochodzenie metody może być odnalezione już w pracach [26], gdzie tzw. stochastyczne równanie Grossa–Pitajewskiego było badane w kontekście formowania się kondensatu Bosego–Einsteina. Podobna idea została zaproponowana w [27], gdzie ewolucja równania w reprezentacji Wignera i tzw. P -reprezentacji została zastosowana do opisu pewnych własności kondensatu. *Sinatra i in.* [2] stosując reprezentację Wignera skonstruowali algorytm, który buduje klasyczne pole w stanie równowagi termodynamicznej o temperaturze T i liczbie atomów N . Metoda ta, znana w anglojęzycznej literaturze jako *truncated Wigner method*, opiera się na badaniu równania Grossa–Pitajewskiego na sieci z dodatkowymi fluktuacjami w stanie początkowym, a poszczególne wielkości średnie obliczane są po stochastycznych realizacjach klasycznego pola. Implementacja ta jest *kanoniczną* wersją metody pól klasycznych opisaną w tej części rozdziału ³.

³Opisaną w tym rozdziale implementację numeryczną metody pól klasycznych nazywać również wersją, lub implementacją *mikrokanoniczną* metody pól klasycznych.

2 Kwantowanie drgań nieliniowej struny

Podstawą metody pól klasycznych jest założenie o makroskopowości obsadzeń wszystkich uwzględnionych modów. Operatory kreacji i anihilacji cząstek w tych modach zostają zastąpione przez zespolone amplitudy. Wydaje się to uzasadnione dla temperatur bardzo małych w porównaniu z temperaturą krytyczną, gdy wszystkie atomy obsadzają ten sam mod o zerowej energii, ale w temperaturach bliskich krytycznej staje się to wątpliwe. Jednak metoda pól klasycznych bardzo dobrze opisuje własności kondensatu Bosego–Einsteina we wszystkich zakresach temperatur.

Kondensacja jest zjawiskiem kwantowym z istotną rolą statystyki, która w teorii kwantowej ujawnia się poprzez bozonowe reguły komutacyjne. Formalizm metody pól klasycznych nie zachowuje relacji komutacyjnych, a mimo to doskonale opisuje bozonowe własności pola. Tu popadamy w swego rodzaju sprzeczność: z jednej strony wiemy, że kondensacja jest czysto kwantowym efektem, z drugiej zaś z sukcesem opisujemy jej własności w języku pól klasycznych. Interesujące jest więc zbadanie w jaki sposób do opisu zostaje wprowadzona stała Plancka istniejąca tylko w teorii kwantowej, oraz jakie dodatkowe elementy pozwalają na kwantową interpretację wyników otrzymanych metodą pól klasycznych.

Dlatego w niniejszym rozdziale badamy czysto klasyczny układ: oscylatorów oddziałujących nieliniowymi siłami. Analizujemy nieliniową dynamikę pola wychyleń oscylatorów, Sprawdzamy w jaki sposób można wprowadzić do opisu stałą Plancka s oraz interpretować wyniki pól klasycznych w języku teorii kwantowej.

2.1 Dynamika nieliniowej struny

Rozważamy jednowymiarowy model elastycznej struny o długości L i liniowej gęstości ρ . Strunę dzielimy na $N - 1$ elementów o długości $l_0 = L/N$ i masie $m = \rho l_0$. Każdy element przybliżamy przez cząstkę punktową oddziałującą z najbliższymi sąsiadami siłami harmonicznymi. Siła F działająca na cząstkę jest proporcjonalna do jej wychYLENIA Δl_0 ze stanu równowagi $F = -Y(\Delta l_0/l_0)$, gdzie Y jest modułem Younga.

W ten sposób, strunę możemy wyobrażać jako N cząstek poruszających się na linii. Każda cząstka oddziałuje ze swoimi dwoma najbliższymi sąsiadami za pomocą sprężyny o stałej $K = Y/l_0$. Oznaczamy położenie równowagi cząstki (oscylatora) jako $x_j = j l_0$ ($j = 1, \dots, N$), a jej wychYLENIE ze stanu równowagi

przez Φ_j . Równanie Newtona wyznaczające dynamikę wychyleń oscylatora ma postać:

$$m\ddot{\Phi}_j = -K(2\Phi_j - \Phi_{j+1} - \Phi_{j-1}), \quad (2.1)$$

na rozwiązanie nakładamy periodyczne warunki brzegowe: $\Phi_j = \Phi_{j+N}$. Równanie (2.1) pojawia się w wielu działach fizyki np. w fizyce ciała stałego w opisie jednowymiarowej sieci krystalicznej. Rozwiązanie analityczne tego równania wyrażone przez fale płaskie można odnaleźć np. w [29].

W kolejnym kroku dopisujemy człon nieliniowy. Dla prostoty zakładamy, że nieliniowe oddziaływanie jest krótkozasięgowe (lokalne), co prowadzi do równania:

$$m\ddot{\Phi}_j = -K(2\Phi_j - \Phi_{j+1} - \Phi_{j-1}) - \Lambda\Phi_j^3, \quad (2.2)$$

gdzie Λ jest rzeczywistym parametrem. Taka forma oddziaływania jest szeroko używana, w szczególności w tzw. teorii pola ϕ^4 [30].

Równanie (2.2) jest podobne do równania badanego przez Fermiego, Pastę i Ulam'a (FPU) [31]. Między tymi równaniami istnieją dwie różnice: warunki brzegowe oraz nieliniowość. W układzie FPU wychylenia pierwszego i ostatniego oscylatora są równe zeru, podczas gdy w naszym przypadku nakładamy periodyczne warunki brzegowe. W równaniach FPU autorzy rozważali nielokalne nieliniowe siły postaci $\alpha(\phi_j - \phi_{j-1})^r$ (r wynosiło 2 lub 3, a stała α była rzędu jedności), w przeciwieństwie do sił lokalnych zastosowanych w naszym układzie. Pierwsze wyniki uzyskane na komputerze *MANIAC* pokazały bardzo małą, jeśli jakkolwiek, tendencję do ekwipartycji energii [31]. W późniejszych latach szczegółowe badania wykazały, że termalizacja zależy od siły nieliniowości.

Wprowadźmy następujący układ jednostek: (*i*) długości L , oraz (*ii*) czasu $t_0 = l_0/c$, gdzie $c = \sqrt{Y/\rho_0}$. Po przejściu do bezwymiarowych zmiennych pola $\phi_j = \Phi_j/L$ i czasu $t = \tau/t_0$, równanie na wychylenie oscylatora przybiera postać:

$$\ddot{\phi}_j = -(2\phi_j - \phi_{j+1} - \phi_{j-1}) - \lambda\phi_j^3, \quad (2.3)$$

gdzie stała sprzężenia

$$\lambda = \frac{\Lambda}{K}L^2. \quad (2.4)$$

Równanie (2.3) ma jedną stałą ruchu, którą jest energia:

$$E = \frac{1}{2} \sum_j [\dot{\phi}_j^2 + (\phi_j - \phi_{j-1})^2 + \lambda \frac{1}{2} \phi_j^4] \quad (2.5)$$

($E = H/\epsilon$, gdzie H jest całkowitą energią a $\epsilon = KL^2$ jest jednostką energii).

Układ równań (2.3) rozwiązywaliśmy numerycznie dla różnych wartości energii E i liczby oscylatorów N . Zarówno początkowe wartości wychyleń ϕ_j jak

i początkowe wartości prędkości $\dot{\phi}_j$ generowaliśmy losowo z przedziału $[-\psi, \psi]$, gdzie ψ jest parametrem, którego wartość zależy od energii (im większa energia tym większe ψ). Krok czasowy został dobrany tak, żeby zapewnić zachowanie energii podczas ewolucji układu.

Ze względu na wybrane periodyczne warunki brzegowe analizowaliśmy wyniki symulacji numerycznych w bazie fal płaskich:

$$\phi_j(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} b_k(t) e^{ikj}, \quad (2.6)$$

gdzie bezwymiarowy wektor falowy $k = 2\pi n$, $n = -N/2, \dots, N/2 - 1$. Zespolone amplitudy $b_k(t)$ spełniają warunek $b_k = b_{-k}^*$ (pole $\phi_j(t)$ przyjmuje tylko wartości rzeczywiste), warunek ten jest automatycznie spełniony podczas implementacji numerycznej. Warto zwrócić uwagę, że mody z wektorem falowym $|k| > |k_{max}|$ nie są obecne a wartość pędu obciążenia k_{max} jest parametrem¹.

2.2 Stan równowagi termodynamicznej

Pierwszym wynikiem symulacji numerycznych jest spostrzeżenie, że każdy stan początkowy (o danej energii i liczbie oscylatorów) w wyniku nieliniowej dynamiki osiąga ten sam stan równowagi. W stanie równowagi $|b_k(t)|$ fluktuje pomiędzy zerem a pewną maksymalną wartością. Oscylacje modu o $k = 0$ mają największą amplitudę. Czas osiągnięcia stanu równowagi zależy od stanu początkowego, oraz wartości λ (rośnie wraz z malejącą siłą nieliniowości). Ponadto, dla bardzo małych λ czas termalizacji jest na tyle duży, że osiągnięcie równowagi jest niemożliwe w realnym czasie trwania symulacji numerycznych. Zajmijmy się teraz szczegółową analizą stanu równowagi.

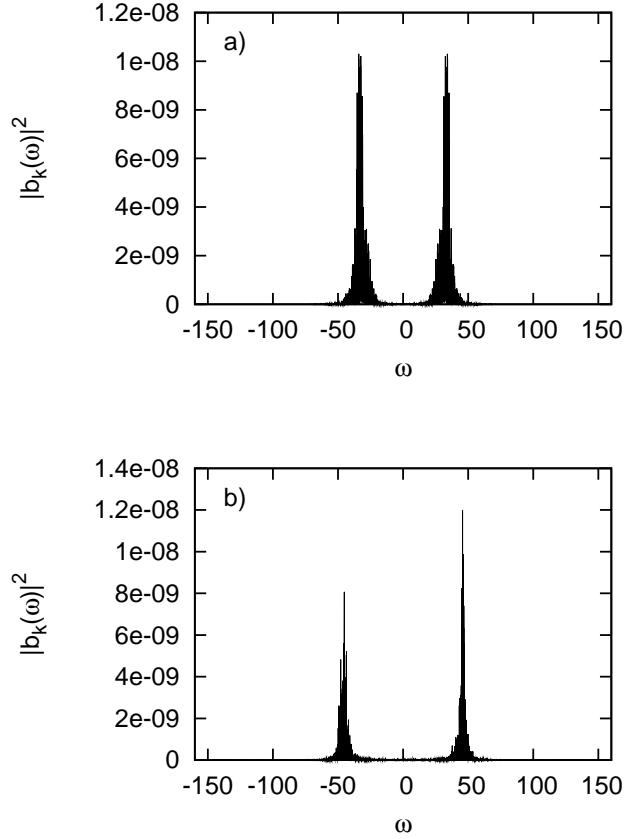
Badając widmo amplitud $b_k(\omega) = \int dt e^{i\omega t} b_k(t)$ uzyskujemy ważne informacje o układzie (typowe widmo amplitud przedstawione jest na rysunku 2.1 dla $k = 0$ i $k = 2\pi \times 5$). Widmo każdego modu składa się z dwóch pików o pozycjach ω_k oraz $-\omega_k$. Wszystkie piki mają skończoną szerokość, która jest mała. Centralne częstotliwości pików ω_k definiujemy jako:

$$\omega_k = \frac{\sum_{\omega>0} \omega |b_k(\omega)|^2}{\sum_{\omega>0} |b_k(\omega)|^2}, \quad (2.7)$$

podobnie zadajemy 'sumaryczne' amplitudy β_k poszczególnych pików:

$$\beta_k = \sqrt{\sum_{\omega>0} |b_k(\omega)|^2}. \quad (2.8)$$

¹ k_{max} jest związany z liczbą punktów na sieci N (liczbą oscylatorów) zależnością $|k_{max}| = \pi N$.



Rysunek 2.1: Widmo amplitud $b_k(\omega) = \int dt \exp(i\omega t) b_k(t)$ dla a) $k = 0$, b) $k = -2\pi \times 5$. Parametry symulacji to $E = 0.1$, $\lambda = 1$, liczba punktów na sieci $N = 64$.

Numeryczne rachunki wskazują, że obliczone częstotliwości ω_k związane są z wektorem falowym zależnością:

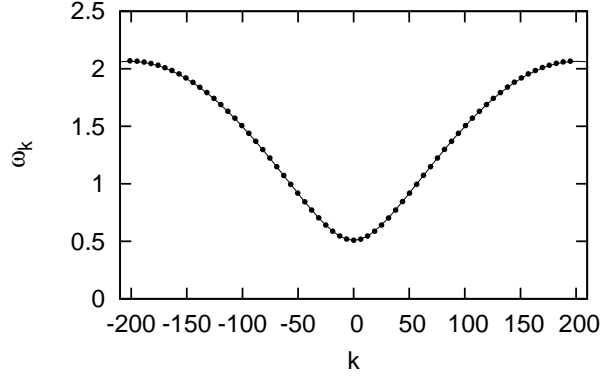
$$\omega_k = \sqrt{4 \sin^2 \frac{k}{2} + \omega_0^2}, \quad (2.9)$$

gdzie ω_0 jest częstotliwością zerowego modu. Numeryczne dopasowanie ω_0 sugeruje, że:

$$\omega_0^2 = 2\lambda\alpha \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} |\beta_k|^2, \quad (2.10)$$

z $\alpha \approx 4.5$. Ponieważ nie badaliśmy układu dla innych wartości λ , nie możemy stwierdzić, że wartość α jest uniwersalna dla naszego modelu. Na rysunku 2.2 przedstawiono relację dyspersyjną ω_k , punkty odpowiadają symulacjom numerycznym, a linia ciągła to formuła (2.9).

Jeżeli zaniedbamy szerokości pików, to wtedy zależność czasową każdej z fal



Rysunek 2.2: Relacja dyspersyjna: punkty to wyniki symulacji numerycznych, natomiast linia oznacza wrór (2.9) z $\alpha = 4.5$. W granicy ciągłej, kiedy równanie (2.3) przyjmuje postać równania falowego, wyraz $4 \sin^2(k/2)$ staje się równy k^2 . Obserwowana relacja dyspersyjna zawierająca $4 \sin^2(k/2)$ jest wynikiem uproszczonej dyskretniej wersji drugiej pochodnej przestrzennej. Parametry symulacji wynoszą $E = 0.1$, $\lambda = 1$, liczba punktów na sieci $N = 64$.

płaskich możemy przybliżyć przez:

$$b_k(t) = \beta_k e^{-i\omega_k t} + \beta_{-k}^* e^{i\omega_k t}. \quad (2.11)$$

Z tej postaci widzimy, że każdy mod drga z dwiema częstotliwościami różniącymi się znakiem.

Całkowita energia oddziałującego układu może zostać wyrażona poprzez amplitudy β_k i częstotliwości ω_k . Rachunki numeryczne wskazują, że są one powiązane zależnością:

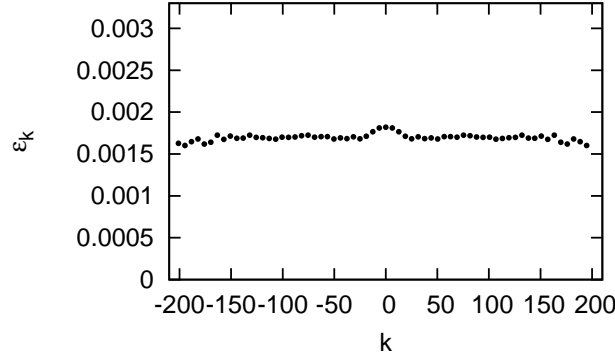
$$E \cong 2 \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} \omega_k^2 |\beta_k|^2. \quad (2.12)$$

Dla różnych energii układu sprawdziliśmy, że różnica pomiędzy wartościami energii danymi równaniami (2.5) i (2.12) jest rzędu 5 – 10%. Możemy, więc przybliżyć postać całkowitej energii przez formułę (2.12).

Rachunki numeryczne dostarczają kolejnej istotnej informacji: całkowita energia jest równomiernie rozłożona na wszystkie mody. Dowodzi to osiągnięcia stanu równowagi przez klasyczny układ podczas nieliniowej ewolucji. Stan ten jest charakteryzowany przez ekwipartycję energii:

$$\varepsilon_k = 2\omega_k^2 |\beta_k|^2 = const, \quad (2.13)$$

gdzie $\varepsilon_k = E/N$ jest energią zgromadzoną w modzie k , i jest taka sama dla wszystkich k . Rysunek 2.3 przedstawia obliczone numerycznie wartości ε_k dla poszczególnych modów. Obserwujemy, że wartość energii zgromadzonej w poszczególnych modach bardzo słabo zależy od k .



Rysunek 2.3: Ekwiartycja energii – energia przypadająca na mod w funkcji wektora falowego k . Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych równania (2.3). Istniejące fluktuacje energii przypadającej na pojedynczy mod mogą być zmniejszone poprzez uśrednianie ε_k po realizacjach, np: próbując $|\beta_k|^2$ w różnych czasach. Parametry symulacji wynoszą $E = 0.1$, $\lambda = 1$, liczba punktów na sieci $N = 64$.

Ekwiartycja energii w klasycznym układzie jest oznaką równowagi termodynamicznej, nie ma ekwiartycji bez równowagi termodynamicznej. W klasycznych układach relacja (2.13) może służyć do definicji temperatury:

$$\tilde{T} = \varepsilon_k, \quad (2.14)$$

gdzie \tilde{T} jest wyrażone w jednostkach ϵ/k_B (k_B jest stałą Boltzmannna). Istnieją różne metody wyznaczania temperatury w układach opisywanych polami klasycznymi, lecz wszystkie muszą być zgodne z relacją ekwiartycji. Jedną z takich metod zaproponowaną przez Rugh'a [32], i została z sukcesem zastosowana przez Davis'a i Morgana [3] w kontekście wyznaczania temperatury chmury termicznej w metodzie pól klasycznych. W swej pracy Davis i Morgan porównują wartości temperatur obliczonych za pomocą relacji ekwiartycji oraz metodą Rugh'a, i pokazują, że wyniki obu metod są zbliżone.

2.3 Elementarne wzbudzenia: fonony

Wyrażenie (2.12) przypomina energię zbioru oscylatorów harmonicznycch o częstości ω_k i amplitudzie $|\beta_k|$. Taki układ można łatwo skwantować i wprowadzić pojęcie fononów.

W pierwszym kroku należy zdefiniować bezwymiarową amplitudę. W tym celu potrzebujemy pewnej uniwersalnej stałej, która ma wymiar działania. Wybieramy oznaczenie \hbar dla tego elementarnego działania, na tym etapie wartość \hbar może być dowolna.

Wprowadzamy charakterystyczną amplitudę $A_0(k)$:

$$A_0(k) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega_k}}, \quad (2.15)$$

gdzie $\Omega_k = \omega_k/t_0$. Energia (2.12) wyrażona przez amplitudy $B_k = \beta_k/A_0(k)$ wynosi:

$$\mathcal{H} = \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} \hbar\Omega_k |B_k|^2. \quad (2.16)$$

W tej postaci całkowita energia jest sumą elementarnych wzbudzeń o energii $\hbar\Omega_k$, a dodatnia wielkość $|B_k|^2$ jest miarą liczby tych wzbudzeń:

$$N_k = |B_k|^2. \quad (2.17)$$

Wprowadzoną wielkość N_k nazywać będziemy liczbą fononów w modzie k ². Ze względu na brak ograniczenia na amplitudę oscylatorów ten klasyczny model może opisywać tylko wzbudzenia typu bozonowego.

Energia (2.16) wyrażona poprzez N_k ma postać:

$$\mathcal{H} = \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} \hbar\Omega_k N_k, \quad (2.18)$$

i jest taka sama jak energia kwantowych oscylatorów.

Relacja ekwipartycji (2.14) wyrażona przez liczbę fononów N_k wynosi:

$$\hbar\Omega_k N_k = k_B T, \quad (2.19)$$

gdzie k_B jest stałą Boltzmana ($k_B T = \epsilon \tilde{T}$). Powyższa postać jest klasyczną granicą ($\hbar\Omega_k/k_B T \ll 1$) rozkładu Bosego–Einsteina dla cząstek o zerowym potencjale chemicznym:

$$N_k = \frac{1}{e^{\hbar\Omega_k/k_B T} - 1} \approx \frac{k_B T}{\hbar\Omega_k}. \quad (2.20)$$

Definiując bezwymiarową amplitudę wprowadziliśmy stałą \hbar o wymiarze działania. Na gruncie teorii klasycznej nie istnieje jednak żaden przepis pozwalający wyznaczyć wartość stałej \hbar , dlatego musimy teraz odwołać się do teorii kwantowej.

Rozważmy energię kwantowych oscylatorów harmonicznyc (2.18). W naszym modelu rozkład gęstości energii jest jednowymiarową analogią rozkładu Plancka ciała doskonale czarnego. Gęstość energii dana rozkładem Plancka jest rosnącą funkcją częstości aż do pewnej maksymalnej wartości, po czym wykładniczo maleje do zera. Początkowy wzrost związany jest z elementem objętości

²Zdefiniowana w ten sposób liczba fononów nie jest liczbą całkowitą, co nie jest poważną wadą jeśli $N_k \gg 1$.

w przestrzeni fazowej, która w trzech wymiarach rośnie jak k^2 , a w jednym wymiarze nie zależy od k . W zastosowanej przez nas implementacji numerycznej wszystkie mody o wektorze falowym $|k| > |k_{max}|$ nie są obsadzone i wykładniczy zanik zastąpiony jest przez ostre obcięcie w $|k| = |k_{max}|$. Pokażemy, że właściwy wybór wartości obcięcia jest istotnym elementem wyznaczającym wartość \hbar .

Analizując gęstość energii zakładamy, że w granicy ciągłej całkowita energia ma postać (2.18) oraz, że rozkład liczby cząstek N_k dany jest przez statystykę Bosego-Einsteina z częstością ω_k w granicy termodynamicznej ($L \rightarrow \infty$ i $\sum_k N_k/L = const$), gdzie $4 \sin^2(k/2) \rightarrow k^2$ w (2.9). Widmo gęstości energii wynosi:

$$\frac{du}{d\omega_k} = \omega_k N_k \frac{dk}{d\omega_k}, \quad (2.21)$$

i w przypadku rozpartywanego jednowymiarowego układu z widmem $\omega_k = \sqrt{\omega_0^2 + k^2}$ ma postać:

$$\frac{du}{d\omega_k} = \frac{2\omega_k^2 N_k}{\sqrt{\omega_k^2 - \omega_0^2}}. \quad (2.22)$$

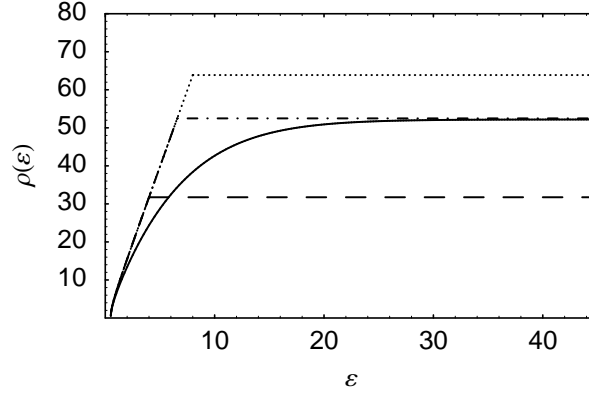
W punkcie $\omega_k = \omega_0$ widmo gęstości energii jest nieoznaczone, ale całkowalne, i przestrzenna gęstość energii $\rho(\mathcal{E})$ zgromadzonej w przedziale energii od 0 do \mathcal{E} jest już dobrze oznaczona:

$$\rho(\mathcal{E}) = \int_0^{\mathcal{E}} \left(\frac{du}{d\omega_k} \right) d\omega_k. \quad (2.23)$$

Na rysunku 2.4 przedstawiono zależność gęstości energii zgromadzonej w przedziale $(0, \mathcal{E})$ w funkcji \mathcal{E} . Linia ciągła odpowiada gęstości energii z kwantowym rozkładem liczby cząstek (2.20), natomiast pozostałe linie odpowiadają gęstości energii z rozkładem klasycznym (2.19). W przypadku kwantowym $\rho(\mathcal{E})$ nasycy się, a wartość energii nasycenia jest jednowymiarowym odpowiednikiem pozycji maksimum rozkładu Plancka. W klasycznym przypadku gęstość energii rośnie liniowo do wartości zależnej od parametru obcięcia, powyżej której jest ona stała. Na rysunku 2.4 pokazano linie dla trzech różnych wartości energii obcięcia $\omega_{k_{max}}$: linia przerywana odpowiada $\omega_{k_{max}} = \tilde{T}$, linia przerywano-kropkowana $\omega_{k_{max}} = 1.64\tilde{T}$, a linia kropkowana $\omega_{k_{max}} = 2\tilde{T}$. Zauważmy, że obcięcie wysokich modów jest w rzeczywistości niczym innym jak symulowaniem kwantowego rozkładu energii.

Gęstość energii z klasycznym rozkładem liczby cząstek może modelować gęstość energii z kwantowym rozkładem, o ile wartość pędu obcięcia jest dobrze dobrana. Obcięcie należy wybrać w zgodzie z teorią kwantową. W rozważanym modelu najlepsze uzgodnienie wyznacza:

$$\hbar\omega_{k_{max}} = 1.64 k_B T. \quad (2.24)$$



Rysunek 2.4: Gęstość energii (2.23) w funkcji \mathcal{E} zgodnie z kwantowym rozkładem Bosego–Einsteina oznaczone linią ciągłą. Gęstość energii $\rho(\mathcal{E})$ z rozkładem Bosego–Einsteina w granicy klasycznej dla trzech różnych wartości energii obciążenia $\omega_{k_{max}}$: $\omega_{k_{max}} = \tilde{T}$ – linia przerywana; $\omega_{k_{max}} = 1.64\tilde{T}$ – linia przerywano - kropkowana; $\omega_{k_{max}} = 2\tilde{T}$ – linia kropkowana. Pozostałe parametry to $\omega_0 = 0.5$ i $\tilde{T} = 1.5$.

i nadaje działaniu \hbar wartość stałej Plancka. Zauważmy, że związek (2.24) przypomina, z dokładnością do czynnika rzędu jeden, prawo przesunięć Wiena³, a w prawie Wiena figuruje stała Plancka.

Porównanie równań (2.24) i (2.19) pokazuje, że liczba fononów w modzie o maksymalnej energii $\Omega_{k_{max}}$ jest rzędu jeden, a dopasowanie do kwantowego rozkładu wyznacza wartość obsadzenia tego modu na:

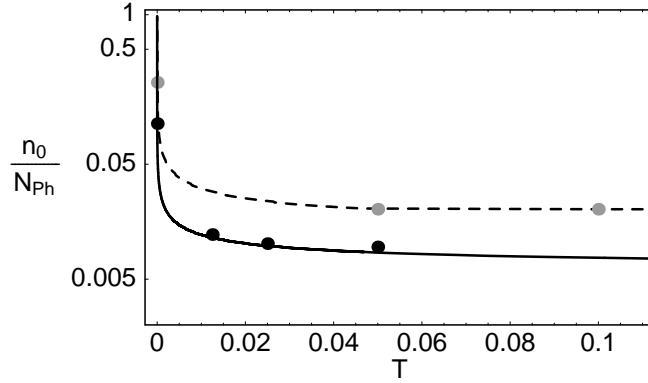
$$N_{k_{max}} = 0.6. \quad (2.25)$$

Zauważmy, że konkluzje zawarte w [23] również sugerują aby obsadzenie modu o maksymalnej energii było w granicach 0.6 – 0.7, co jest zgodne z naszym wynikiem.

Równanie (2.24), czyli warunek uzgodnienia klasycznego rozkładu gęstości energii z rozkładem kwantowym, wprowadza stałą Plancka do teorii pól klasycznych. Uzgodnienie obu rozkładów może być alternatywną metodą ustalenia wartości $N_{k_{max}}$. Jednakże, dla prostoty w większości zastosowań metody pól klasycznych przyjmuje się $N_{k_{max}} = 1$. W przykładzie 1, stosujemy ten wynik i pokazujemy, w jaki sposób można numerycznie obliczyć obsadzenie modu o zerowej energii w funkcji temperatury.

Przykład 1 *Prezentujemy zastosowanie omówionej procedury do wyznaczenia populacji modu o zerowej energii w funkcji temperatury. Najpierw rozwiązujemy równanie (2.3) dla zadanej energii i liczby punktów na sieci, w naszych rachunkach wybieraliśmy raczej małe wartości N od 16 do 1024. Następnie spraw-*

³Prawo Wiena określa zmianę położenia maksimum rozkładu gęstości energii ciała doskonale czarnego ze względu na temperaturę.



Rysunek 2.5: Frakcja liczby fononów w modzie $k = 0$ w funkcji temperatury dla dwóch wartości całkowitej liczby fononów: $N_{Ph} = 85$ (punkty szare) i $N_{Ph} = 175$ (punkty czarne). Punkty – to wyniki symulacji numerycznych równania (2.3) z $\lambda = 1$, a linia ciągła – to dopasowanie z $\alpha = 4.5$.

dzamy czy układ osiągnął stan równowagi termodynamicznej poprzez oszacowanie na kilku etapach ewolucji czy wyznaczone częstotliwości ω_k i amplitudy β_k spełniają relację ekwipartycji. Kiedy stan stacjonarny zostanie osiągnięty, z warunku $N_{k_{max}} = 1$ obliczamy całkowitą liczbę fononów, a z relacji ekwipartycji temperaturę. Populacje wszystkich modów wyznaczamy w następujący sposób:

$$N_k = \frac{|\beta_k|^2}{|\beta_{k_{max}}|^2}. \quad (2.26)$$

Jeżeli liczba fononów $N_{Ph} = \sum_k N_k$ jest inna niż zakładana, zmieniamy liczbę punktów na sieci i powtarzamy rachunki. Im mniejsza jest energia, tym mniejsze musi być N aby całkowita liczba fononów została zachowana. W ten sposób można wyznaczyć obsadzenia wszystkich modów w funkcji temperatury dla zadanej wartości całkowitej liczby fononów.

Rysunek 2.5 przedstawia populacje modu o $k = 0$ w funkcji temperatury dla stałej $\lambda = 1$ i dwóch różnych wartości całkowitej liczby fononów. Linie oznaczają dopasowanie do punktów numerycznych. Jak widać na rysunku 2.5, obsadzenie zerowego modu gwałtownie rośnie w otoczeniu $T \approx 0$. W analizowanym przykładzie nie ma przejścia fazowego, ponieważ układ jest jednowymiarowy.

Uwagi

1. Rola parametru obciążenia została już podkreślona w [28] i zauważając, że obciążenie jest ważnym parametrem nie wnosimy nic nowego. Natomiast istotne jest zrozumienie, że obciążenie modów o wysokich energiach wynika nie tylko z implementacji lub samouzgodnienia metody pól klasycznych,

lecz jest nieuchronnie związane z wprowadzeniem do prezentowanej teorii klasycznej stałej Plancka i zezwala na interpretację wyników w języku teorii kwantowej.

2. W celu zdefiniowania liczby fononów wprowadziliśmy uniwersalną stałą o wymiarze działania. Analiza gęstości energii wykazała, że klasyczne pole wychyleń oscylatorów może modelować pole bozonowe jeśli *(i)* zostanie wprowadzony pęd obciążenia, którego wartość zostanie uzgodniona z rozkładem kwantowym, oraz *(ii)* obsadzenia modów będą makroskopowe. Należy zwrócić uwagę, że nasza obserwacja jest spójna z analogią do pola elektromagnetycznego. Klasyczny opis pola elektromagnetycznego w stanie równowagi termodynamicznej również cierpi na podobne problemy jak teoria pól klasycznych do opisu masywnych bozonów. Ekwipartycja energii nieuchronnie prowadzi do katastrofy w nadfiolecie i konieczne jest wprowadzenie obciążenia modów o wysokich energiach. Uzgodnienie klasycznych i kwantowych rozkładów energii w naszym przypadku pozwoliło na ustalenie wartości wprowadzono działania na wartość stałej Plancka.

3 Dynamika fazy kondensatu Bosego–Einsteina

Kondensat Bosego–Einsteina można w przybliżeniu opisać globalną funkcją falową. Faza tej funkcji jest zmienną, która istotnie wpływa na wiele właściwości kondensatu. W niniejszym rozdziale prezentujemy zastosowanie metody pól klasycznych do badania dynamiki fazy w niezerowej temperaturze.

Dynamika fazy kondensatu Bosego–Einsteina była już analizowana teoretycznie w temperaturze zerowej [34], oraz doświadczalnie [35]. Szereg autorów podjęło również zadanie analizy dynamiki fazy w niezerowej temperaturze. W szczególności, *Graham* [36] przewiduje dyfuzję fazy (liniową dynamikę wariancji fazy) zakładając, że kondensat ewoluuje pod wpływem krótkozasięgowej siły Langevina. Inny wynik został otrzymany przez *Kuklova* [37], który wykazał, że wariancja fazy zależy kwadratowo od czasu. Rezultat ten zgadza się jakościowo z wynikami tego rozdziału, lecz otrzymany współczynnik proporcjonalności jest inny. Wszyscy autorzy zgodnie twierdzą, że faza kondensatu Bosego–Einsteina zmienia się, na co wpływ mają zarówno fluktuacje jak i temperatura.

Układ jaki rozważamy, to jednorodny gaz atomów w stanie równowagi termodynamicznej. Gaz znajduje się w potencjale pudła, co niezwykle upraszcza rachunki numeryczne i analityczne, oraz pozwala na zrozumienie fizyki rządzącej dynamiką fazy¹. Podczas ewolucji układu zachowana jest całkowita energia oraz liczba atomów. Dynamikę fazy opisujemy numerycznie, stosując metodę pól klasycznych, oraz analitycznie za pomocą metody Bogoliubowa. Eksperyment numeryczny, który traktujemy jako ścisły wynik, opisujemy jakościowo i ilościowo w ramach trzech przybliżeń: Bogoliubowa, Bogoliubowa z uwzględnieniem skończonego czasu życia kwazicząstek oraz przybliżenia zakładającego ergodyczność dynamiki. Koncentrujemy się na obliczeniu zależności czasowej i temperaturowej trzech funkcji: (*i*) dwuczasewej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie, (*ii*) dwuczasewej funkcji korelacji amplitudy modu o zerowej energii, oraz (*iii*) wariancji fazy kondensatu.

3.1 Klasyczne pole na sieci: model

Rozważamy jednorodny gaz N zimnych atomów w równowadze termodynamicznej. Kondensat i chmurę termiczną opisujemy klasycznym polem $\psi(\mathbf{r}, t)$ na sieci w trzech wymiarach. Odległości pomiędzy punktami siatki wynoszą

¹W doświadczeniu sytuacja jest bardziej złożona – atomy są spulapkowane, a pomiar jest dość delikatną procedurą opierającą się na interferencji dwóch kondensatów.

l_x, l_y, l_z oraz $dV = l_x l_y l_z$ jest objętością jednostkowej komórki. W każdym z kierunków zadajemy periodyczne warunki brzegowe o okresach przestrzennych L_x, L_y, L_z (objętość $V = L_x L_y L_z$).

Ze względu na periodyczne warunki brzegowe rozkładamy pole w bazie fal płaskich:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}, \quad (3.1)$$

gdzie wektor falowy $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ jest ograniczony do pierwszej strefy Brillouin'a ($k_j \in [-\pi/l_j, \pi/l_j]$, a j oznacza kierunek w przestrzeni). Klasyczne pole ψ normujemy do całkowitej liczby atomów N :

$$\sum_{\mathbf{r}} dV |\psi(\mathbf{r})|^2 = N. \quad (3.2)$$

Liczbę N_0 atomów skondensowanych, oraz fazę kondensatu θ definiujemy za pomocą amplitudy a_0 modu o zerowym pędzie :

$$a_0 = \sqrt{N_0} e^{i\theta}. \quad (3.3)$$

Hamiltonian układu ma następującą postać:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{r}} dV \psi^*(\mathbf{r}) \Delta \psi(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} dV \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (3.4)$$

gdzie Δ oznacza laplasjan, $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ jest stałą sprzężenia, natomiast a jest długością rozpraszania fali typu s . Ewolucja pola wyznaczona jest poprzez nieliniowe równanie Shrödingera (NLSE):

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + g |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.5)$$

Nieliniowa dynamika zachowuje energię oraz całkowitą liczbę atomów.

W dalszej części koncentrujemy się na analizie trzech wielkości fizycznych:

- dwuczaskowej funkcji korelacji amplitudy modu kondensatu:

$$\langle a_0^*(t) a_0(0) \rangle, \quad (3.6)$$

- dwuczaskowej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie:

$$\langle \delta N_0(t) \delta N_0(0) \rangle, \quad \text{gdzie} \quad \delta N_0 = N_0 - \langle N_0 \rangle, \quad (3.7)$$

- wariacji fazy kondensatu:

$$\text{Var } \varphi(t) = \langle \varphi(t)^2 \rangle - \langle \varphi(t) \rangle^2, \quad \text{gdzie} \quad \varphi(t) = \theta(t) - \theta(0). \quad (3.8)$$

3.2 Implementacja numeryczna

W niniejszym rozdziale stosujemy uproszczoną *kanoniczną* implementację metody pól klasycznych. Podstawowe różnice pomiędzy wersją *kanoniczną* a *mikrokanoniczną*, omawianą we wprowadzeniu, to parametry kontroli oraz sposób uśredniania. W wersji kanonicznej metody pól klasycznych parametrami kontroli są temperatura T i liczba atomów N , podczas gdy w wersji mikrokanonicznej są to energia H i parametr gN . Kanoniczna wersja opiera się na uśrednianiu po zespole stochastycznych realizacji pola, a nie po czasie i przestrzeni jak to ma miejsce w wersji mikrokanonicznej. Dodatkowo, istotnym parametrem obu implementacji metody pól klasycznych jest parametr obciążenia modów o wysokich energiach. Obie implementacje, jak to sprawdziła autorka niniejszej rozprawy, wyznaczają porównywalne wartości temperatury, liczby atomów i obsadzeń modów. Jednak zastosowanie kanonicznej formy implementacji metody pól klasycznych jest wygodniejsze, ze względu na analizę zależnych od czasu funkcji.

Nieliniowe równanie Schrödingera (3.5) rozwiązujemy numerycznie metodą rozdzielonych operatorów (ang. split operator). Poszczególne parametry symulacji numerycznych to $L_x^2 = \sqrt{2}$, $L_y^2 = (1 + \sqrt{5})/2$, $L_z^2 = \sqrt{3}$, całkowita liczba atomów $N = 4 \times 10^5$, nieliniowość $gN/V = 700\hbar^2/2m$, oraz liczba stochastycznych realizacji pola $N_{reals} = 500$. Liczba punktów na sieci została dobrana tak, żeby temperatura była równa $T = [(\hbar^2 k_{max}^2/2m)(2Ng/V + \hbar^2 k_{max}^2/2m)]^{1/2}/3k_B$, co oznacza, że ustalamy obsadzenie modu o najwyższej energii na 1/3:

$$\langle a_{\mathbf{k}_{max}}^* a_{\mathbf{k}_{max}} \rangle = N_{\mathbf{k}_{max}} = \frac{1}{3}. \quad (3.9)$$

Stan początkowy pola generujemy w przestrzeni pędów dla zadanej temperatury T oraz całkowitej liczby atomów N [38].

W pierwszym kroku tworzymy część pola opisującą frakcję nieskondensowaną. W tym celu losujemy zespolone amplitudy $b_{\mathbf{k}}(0)$ z rozkładu prawdopodobieństwa ²:

$$P(b_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\pi k_B T} \epsilon_{\mathbf{k}} e^{-|b_{\mathbf{k}}|^2 \epsilon_{\mathbf{k}}/k_B T}, \quad (3.10)$$

gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}} = [E_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}} + 2gN/V)]^{1/2}$ jest energią wzbudzeń Bogoliubowa, a $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m$. Następnie, zgodnie z transformacją Bogoliubowa, budujemy fragment pola dla $\mathbf{k} \neq 0$ opisujący nieskondensowaną frakcję:

$$\psi(\mathbf{k} \neq 0, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{V}} (b_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + b_{-\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}). \quad (3.11)$$

²Stosujemy metodę Box-Muller [39].

Rzeczywiste funkcje v_k i u_k dane są odpowiednio przez równania (1.22) i (1.21). Za pomocą tak skonstruowanego fragmentu pola obliczamy liczbę atomów nieskondensowanych:

$$N_{\perp} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} |\psi(\mathbf{k} \neq 0, t = 0)|^2. \quad (3.12)$$

W drugim kroku budujemy fragment pola opisujący frakcję skondensowaną. Najpierw obliczamy liczbę atomów skondensowanych N_0 :

$$N_0 = N - N_{\perp}, \quad (3.13)$$

po czym pole dla $\mathbf{k} = 0$:

$$\psi(k = 0, t = 0) = \sqrt{N_0} e^{i\theta(t=0)}, \quad (3.14)$$

gdzie $\theta(t = 0)$ jest początkową fazą kondensatu losowaną z przedziału $[0, 2\pi]$.

Za pomocą transformacji Fouriera przekształcamy pole $\psi(\mathbf{k}, t = 0)$ do przestrzeni położenia:

$$\psi(\mathbf{r}, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{k}, t = 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.15)$$

w ten sposób konstruujemy pole $\psi(\mathbf{r}, t = 0)$ w stanie równowagi termodynamicznej.

Algorytm ten działa bardzo dobrze dla niskich temperatur. Jednak, ze względu na zawodność procedury Bogoliubowa dla temperatur bliskich temperatury krytycznej, po wygenerowaniu pola $\psi(\mathbf{r}, t = 0)$ najlepiej jest poddać go wstępnej ewolucji do osiągnięcia stanu równowagi termodynamicznej.

W *kanonicznej* implementacji uśredniamy poszczególne wielkości po zespole pól $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots, \psi^{(N_{reals})}$, który budujemy dla zadanej liczby realizacji N_{reals} . Poszczególne wielkości średnie obliczamy po tym zespole stochastycznych realizacji pola.

Przykład 2 Średnią liczbę atomów w kondensacie, w pewnej chwili czasu, obliczamy w następujący sposób:

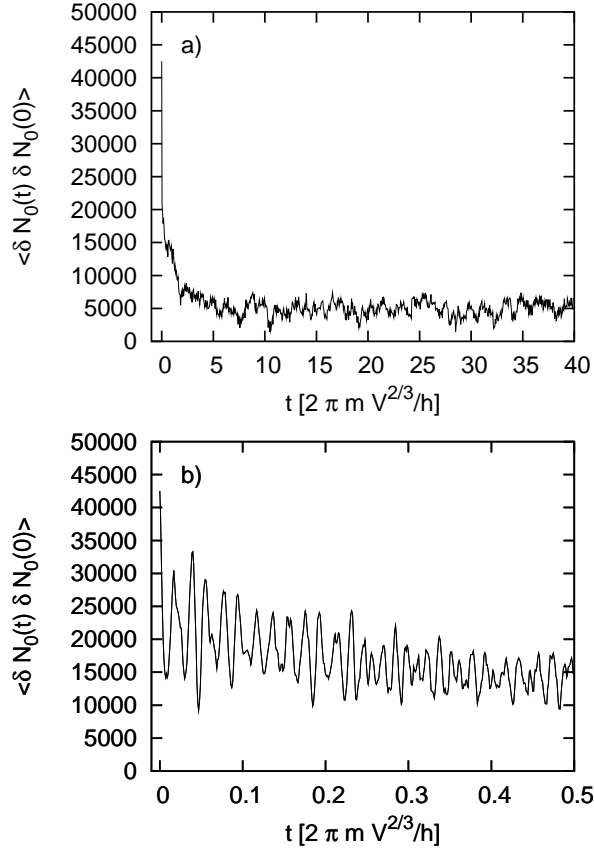
$$\langle N_0 \rangle = \frac{1}{N_{reals}} \sum_{j=1}^{N_{reals}} |a_0^{(j)}|^2. \quad (3.16)$$

3.3 Metoda pól klasycznych: wyniki symulacji numerycznych

Opisane w tym podrozdziale wyniki symulacji numerycznych otrzymane metodą pól klasycznych, traktujemy jako poprawnie opisujące dynamikę fazy. W następnym podrozdziale, za pomocą przybliżonych modeli analitycznych, spróbujemy zrozumieć mechanizm stojący za dynamiką poszczególnych funkcji.

Dwucziasowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie

Na rysunku 3.1 prezentujemy dwucziasową funkcję korelacji liczby atomów w kondensacie (a) dla długich czasów, oraz (b) dla krótkich czasów. Wynik symulacji dla czasów długich został dodatkowo uśredniony po czasie $t = 0.1$. Zauważmy, że na odcinku czasu $t \in (0, 5)$ obserwujemy gwałtowny zanik funkcji, a dla czasów $t > 5$ funkcja fluktuuje wokół niezerowej wartości. Brak zaniku funkcji dla długich czasów oznacza nieskończony czas korelacji liczby atomów w kondensacie. Parametry symulacji numerycznych wynoszą: temperatura $T = 0.082T_c$ (T_c jest temperaturą krytyczną gazu doskonałego³), całkowita liczba atomów $N = 4 \times 10^5$. Stała sprzężenia g została dobrana tak, by potencjał chemiczny Bogoliubowa wynosił $\mu = gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

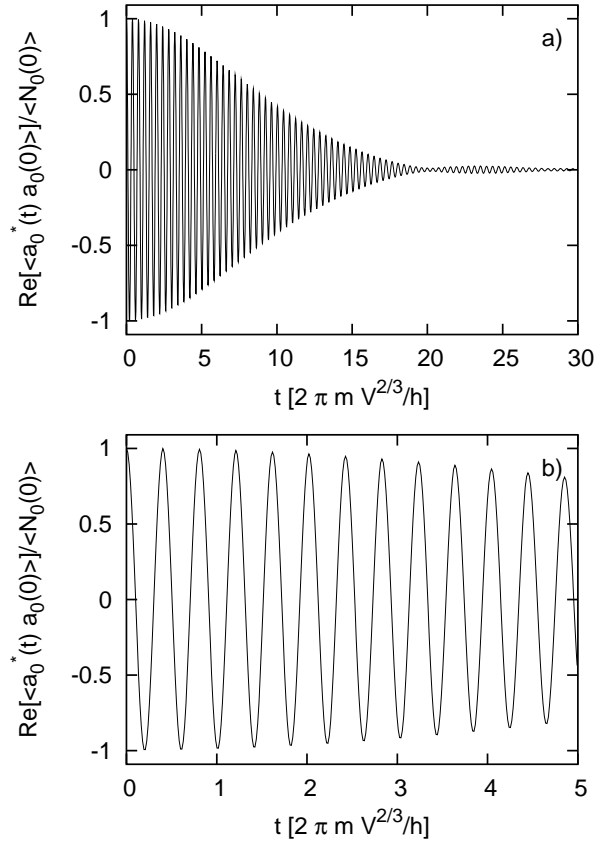


Rysunek 3.1: Dwucziasowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie a) długoczasowe zachowanie uśrednione po czasie $t = 0.1$, b) krótkoczasowe zachowanie (bez uśredniania). Niezerowa wartość funkcji dla długich czasów oznacza nieskończony czas korelacji. Temperatura wynosi $T = 0.082T_c$, ($T_c = (2\pi\hbar^2/m)(N/V\zeta(3/2))^{2/3}$ jest temperaturą gazu doskonałego), całkowita liczba atomów $N = 4 \times 10^5$, stała sprzężenia g została dobrana tak by potencjał chemiczny Bogoliubowa wynosił $\mu = gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

³ $T_c = (2\pi\hbar^2/m)(N/V\zeta(3/2))^{2/3}$

Dwuczasowa funkcja korelacji amplitudy modu o zerowej energii

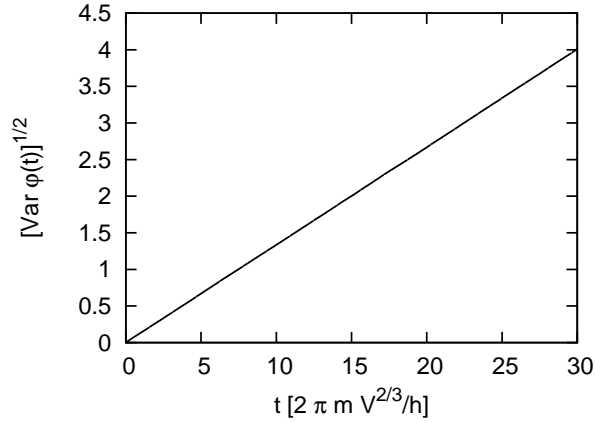
Na rysunku 3.2 pokazana jest dynamika części rzeczywistej funkcji korelacji amplitudy modu kondensatu, funkcja korelacji unormowana jest do liczby atomów w kondensacie. Rysunek 3.2a przedstawia długoczasowe zachowanie, podczas gdy rysunek 3.2b pokazuje krótkoczasowe zachowanie funkcji korelacji. W chwili czasu $t = 0$ wartość funkcji jest równa dokładnie jeden, po czym oscylując w czasie maleje do zera. Zanik funkcji korelacji związany jest z oddziaływaniem cząstek w kondensacie z cząstkami termicznymi. Poszczególne parametry symulacji wynoszą: temperatura $T = 0.171T_c$, całkowita liczba atomów $N = 4 \times 10^5$, potencjał chemiczny $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.



Rysunek 3.2: Część rzeczywista dwuczaskowej funkcji korelacji amplitudy modu kondensatu unormowana do jej wartości w chwili początkowej $t = 0$. Funkcja dąży do zera dla długich czasów. Temperatura wynosi $T = 0.171T_c$, $N = 4 \times 10^5$ i $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

Wariancja fazy kondensatu

Dynamika pierwiastka z wariancji fazy kondensatu $\sqrt{\text{Var } \varphi(t)}$ przedstawiona jest na rysunku 3.3. Obserwujemy liniową zależność, co oznacza, że wariancja fazy jest kwadratową funkcją czasu: $\text{Var } \varphi(t) \sim t^2$. Parametry symulacji wynoszą: temperatura $T = 0.171T_c$, całkowita liczba atomów $N = 4 \times 10^5$, oraz potencjał chemiczny $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.



Rysunek 3.3: Pierwiastek z wariancji fazy kondensatu – odchylenie standardowe zmiany fazy kondensatu. Wynik ten wskazuje, że wariancja fazy jest kwadratową funkcją czasu $\text{Var } \varphi(t) \sim t^2$. Parametry symulacji: $T = 0.171T_c$, $N = 4 \times 10^5$ oraz $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

3.4 Metoda Bogoliubowa: wyniki rachunków analitycznych

Rachunki analityczne zostały przeprowadzone w ramach: 1) przybliżenia Bogoliubowa, które nazywać będziemy modelem Bogoliubowa, 2) przybliżenia Bogoliubowa uwzględniającego skończony czas życia kwazicząstek, które również nazywać będziemy modelem gaussowskim, oraz 3) przybliżenia opartego na hipotezie ergodycznej, które w dalszej części nazywać będziemy modelem ergodycznym. Wszystkie trzy przybliżenia opierają się na metodzie Bogoliubowa.

W modelu Bogoliubowa zakładamy, że zależność czasowa pola $\psi(\mathbf{r}, t)$ dana jest przez transformację Bogoliubowa:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{a_0}{\sqrt{V}} + \psi_{\perp}(\mathbf{r}, t), \quad (3.17)$$

gdzie ψ_{\perp} opisuje frakcję nieskondensowaną, przy czym rozkład prawdopodobieństwa amplitud $b_{\mathbf{k}}(0)$ jest gaussowski:

$$P(b_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{k_B T} e^{-|b_{\mathbf{k}}|^2 \epsilon_{\mathbf{k}}/k_B T}. \quad (3.18)$$

Rozszerzeniem modelu Bogoliubowa jest przybliżenie Bogoliubowa uwzględniające skończony czas życia kwazicząstek ze względu na procesy Beliaev'a-Landaua. Procesy te zostaną szczegółowo omówione w dalszej części.

W modelu ergodycznym zakładamy, że nieliniowa dynamika generowana przez NLSE jest ergodyczna. Oznacza to, że w dostatecznie długim czasie amplitudy $b_{\mathbf{k}}(t)$ danej realizacji pola jednorodnie przepenetrowały powierzchnię stałej energii w przestrzeni fazowej. Zatem $b_{\mathbf{k}}(t)$ próbują następujący rozkład prawdopodobieństwa:

$$P_{\infty}(\{b_{\mathbf{k}}\}) = \delta \left(E - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_k b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) \right) \quad (3.19)$$

z energią E wyznaczoną przez metodę Bogoliubowa:

$$E = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_k b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}}(0). \quad (3.20)$$

3.4.1 Funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie

Ze względu na zachowaną całkowitą liczbę atomów N , funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie jest równa funkcji korelacji liczby atomów nieskondensowanych N_{\perp} :

$$\langle \delta N_0(t) \delta N_0(0) \rangle = \langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle, \quad (3.21)$$

gdzie

$$\delta N_{\perp}(t) = N_{\perp}(t) - \langle N_{\perp}(t) \rangle. \quad (3.22)$$

Wygodnie jest analizować (3.21) w formie:

$$\langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle = \langle N_{\perp}(t) N_{\perp}(0) \rangle - \langle N_{\perp}(t) \rangle \langle N_{\perp}(0) \rangle, \quad (3.23)$$

z poszczególnymi elementami:

$$\langle N_{\perp}(t) \rangle = \sum_{\mathbf{r}} \langle |\psi_{\perp}(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle, \quad (3.24)$$

$$\langle N_{\perp}(t) N_{\perp}(0) \rangle = \sum_{\mathbf{r} \mathbf{r}'} \langle |\psi_{\perp}(\mathbf{r}, t)|^2 |\psi_{\perp}(\mathbf{r}', 0)|^2 \rangle. \quad (3.25)$$

(i) Model Bogoliubowa.

Transformacja Bogoliubowa (podrozdział 1.2) wyznacza postać pola opisująca atomy nieskondensowane:

$$\psi_{\perp}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} (u_k b_{\mathbf{k}}(t) + v_k b_{-\mathbf{k}}^*(t)), \quad (3.26)$$

gdzie zależność czasowa amplitud $b_{\mathbf{k}}$ jest następująca:

$$b_{\mathbf{k}}(t) = b_{\mathbf{k}}(0) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad \text{z} \quad \omega_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}}/\hbar. \quad (3.27)$$

Stosując transformację Bogoliubowa, widzimy, że interesująca nas funkcja $\langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle$ zależy od dwupunktowych funkcji korelacji typu:

- $\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle$,
- $\langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle$,

oraz od czteropunktowych funkcji korelacji typu:

- $\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle$,
- $\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) b_{-\mathbf{k}'}^*(0) \rangle$,
- $\langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{-\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}(0) b_{-\mathbf{k}'}(0) \rangle$.

Wszystkie funkcje korelacji obliczamy z gaussowskim rozkładem prawdopodobieństwa (3.18). W przykładach 3 i 4 pokazane są rachunki wyznaczające odpowiednio pierwszą dwupunktową, oraz pierwszą czteropunktową funkcję korelacji.

Przykład 3 *Obliczamy funkcję korelacji $\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle$ z gaussowskim rozkładem prawdopodobieństwa. Ponieważ częstości $\omega_{\mathbf{k}}$ nie zależą od amplitud, prawdziwe jest:*

$$\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle = e^{i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}'})t} \langle b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle. \quad (3.28)$$

Koncentrujemy się na części niezależnej od czasu.

Zapisujemy amplitudy $b_{\mathbf{k}}^(0)$ oraz $b_{\mathbf{k}'}(0)$ w postaci:*

$$b_{\mathbf{k}}^*(0) = x_{\mathbf{k}} - iy_{\mathbf{k}}, \quad (3.29)$$

$$b_{\mathbf{k}'}(0) = x_{\mathbf{k}'} + iy_{\mathbf{k}'}, \quad (3.30)$$

gdzie $x_{\mathbf{k}} = \text{Re}\{b_{\mathbf{k}}(0)\}$, $y_{\mathbf{k}} = \text{Im}\{b_{\mathbf{k}}(0)\}$. Zgodnie z tymi oznaczeniami iloczyn $b_{\mathbf{k}}^(0) b_{\mathbf{k}'}(0)$ ma postać:*

$$b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) = x_{\mathbf{k}}x_{\mathbf{k}'} + y_{\mathbf{k}}y_{\mathbf{k}'} + i(x_{\mathbf{k}}y_{\mathbf{k}'} - y_{\mathbf{k}}x_{\mathbf{k}'}), \quad (3.31)$$

a rozkład prawdopodobieństwa wynosi:

$$P(\{x_{\mathbf{k}} + iy_{\mathbf{k}}\}) = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\pi k_B T} e^{-(x_{\mathbf{k}}^2 + y_{\mathbf{k}}^2)\epsilon_{\mathbf{k}}/k_B T}. \quad (3.32)$$

Funkcja korelacji $\langle b_{\mathbf{k}}^(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle$ jest wyznaczona poprzez całkę:*

$$\begin{aligned} \langle b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle &= \iiint \int_{-\infty}^{\infty} dx_{\mathbf{k}} dx_{\mathbf{k}'} dy_{\mathbf{k}} dy_{\mathbf{k}'} \times \\ &\times [x_{\mathbf{k}}x_{\mathbf{k}'} + y_{\mathbf{k}}y_{\mathbf{k}'} + i(x_{\mathbf{k}}y_{\mathbf{k}'} - y_{\mathbf{k}}x_{\mathbf{k}'})] \times \\ &\times P(\{x_{\mathbf{k}} + iy_{\mathbf{k}}\}) P(\{x_{\mathbf{k}'} + iy_{\mathbf{k}'}\}). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Wykonując całki gaussowskie otrzymujemy:

$$\langle b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{k_B T}{\epsilon_{\mathbf{k}}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}}. \quad (3.34)$$

Wynik ten równy jest liczbie kwazicząstek Bogoliubowa w modzie \mathbf{k} , wyznaczonej przez klasyczną granicę ($k_B T \gg \epsilon_{\mathbf{k}}$) rozkładu Bosego-Einsteina:

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{k_B T}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \leftarrow \frac{1}{e^{\epsilon_{\mathbf{k}}/k_B T} - 1}. \quad (3.35)$$

Postać poszczególnych dwupunktowych funkcji korelacji jest następująca:

$$\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}}, \quad (3.36)$$

$$\langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}(t) \rangle = 0. \quad (3.37)$$

Przykład 4 W celu obliczenia funkcji korelacji czwartego rzędu można przeprowadzić rachunek analogiczny jak w przykładzie 3, albo zastosować twierdzenie Wick'a dla średnich gaussowskich [40]. W przykładzie tym użyjemy drugi sposób.

Zgodnie z twierdzeniem Wick'a funkcja korelacji dowolnego parzystego rzędu jest sumą po permutacjach dwupunktowych funkcji korelacji. W naszym przypadku czteropunktowa funkcja korelacji ma postać:

$$\begin{aligned} \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle &= \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) \rangle \langle b_{\mathbf{k}'}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \\ &+ \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) \rangle \\ &+ \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) \rangle \langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle, \end{aligned} \quad (3.38)$$

z (3.36 – 3.37) otrzymujemy

$$\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle = n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'} . \quad (3.39)$$

Po zastosowaniu twierdzenia Wicka dla czteropunktowych funkcji korelacji, dwuczasaowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)(u_{\mathbf{k}'}^2 + v_{\mathbf{k}'}^2) \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \langle b_{\mathbf{k}}(t) b_{\mathbf{k}'}^*(0) \rangle \\ &+ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \{ \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle \langle b_{-\mathbf{k}}^*(t) b_{-\mathbf{k}'}(0) \rangle \\ &+ \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{-\mathbf{k}'}(0) \rangle \langle b_{-\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}'}(0) \rangle + c.c. \}] \end{aligned} \quad (3.40)$$

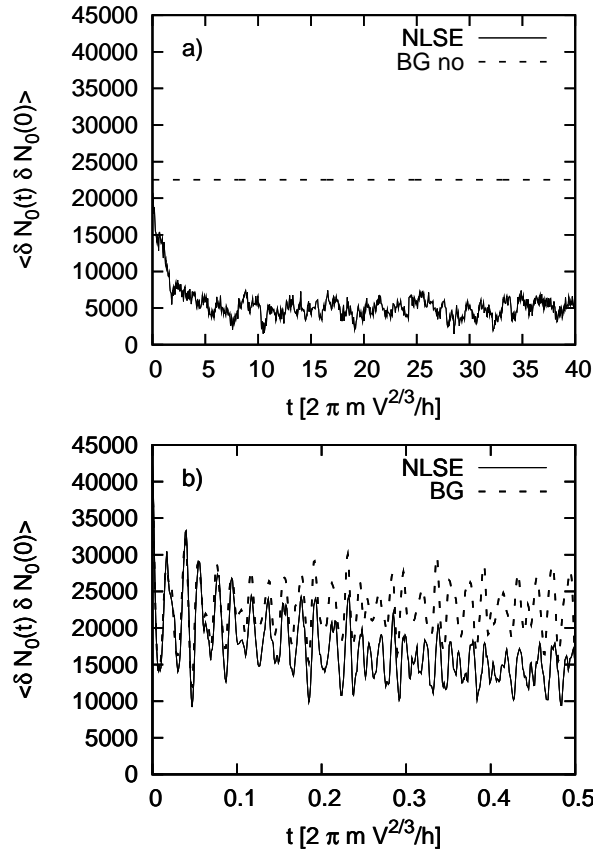
i uwzględniając wyrazy (3.36 – 3.37) dla dwupunktowych funkcji korelacji otrzymujemy:

$$\langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle_{BG} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}}^2 [(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)^2 + 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 \cos(2\omega_{\mathbf{k}} t)] . \quad (3.41)$$

Pomijając wyrazy gwałtownie oscylujące, interesująca nas funkcja wynosi:

$$\langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle_{BGno} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} n_{\mathbf{k}}^2 [(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)^2] . \quad (3.42)$$

Na rysunku 3.4 zestawiono wyniki symulacji numerycznych nieliniowego równania Schrödingera (3.5) z wynikami modelu Bogoliubowa. Dla bardzo krótkich czasów (rysunek 3.4b) obserwowana jest dobra zgodność wyników symulacji numerycznych z formułą (3.41), która prawidłowo odtwarza pierwsze oscylacje. Długoczasowe zachowanie funkcji nie jest poprawnie opisane przez model Bogoliubowa, co widać na rysunku 3.4a, gdzie wyniki symulacji numerycznych porównano z wynikami modelu Bogoliubowa z zaniedbanymi wyrazami oscylującymi w czasie.



Rysunek 3.4: Porównanie wyników symulacji numerycznych (NLSE – linia ciągła) z wynikami modelu Bogoliubowa (BG – linia przerywana): *a*) długoczasowe zachowanie uśrednione po czasie $t = 0.1$ porównane jest ze wzorem (3.42), oraz *b*) krótkoczasowe zachowanie (bez uśredniania) porównane z formułą (3.41). Zgodność jest obserwowana tylko dla bardzo krótkich czasów. Model Bogoliubowa błędnie przewiduje długoczasowe zachowanie funkcji. Parametry symulacji to: $T = 0.082T_c$, $N = 4 \times 10^5$, oraz $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

(ii) **Model gaussowski.**

Uwzględnienie oddziaływania między kwazicząstkami prowadzi do zaniku dwupunktowej funkcji korelacji:

$$|\langle b_{\mathbf{k}}^*(t)b_{\mathbf{k}}(0) \rangle| = n_{\mathbf{k}}e^{-\gamma_{\mathbf{k}}t}, \quad (3.43)$$

gdzie $\gamma_{\mathbf{k}}^{-1}$ jest charakterystycznym czasem zaniku. Istnienie niezerowej wartości $\gamma_{\mathbf{k}}$ jest związane ze skończonym czasem życia kwazicząstek Bogoliubowa, które ze względu na oddziaływania między sobą mogą zniknąć w jednym modzie i pojawiać się w innych.

Do obliczenia wartości $\gamma_{\mathbf{k}}$ zastosujemy rachunek zaburzeń, który został zaproponowany przez *A. Sinatré i in.* [38] (wyniki innych autorów można znaleźć w [41]).

Zaczynamy od nieliniowego równania Schrödingera (NLSE) na pole $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + g|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.44)$$

następnie rozwijamy (3.44) do wyrazów drugiego rzędu w $\psi(\mathbf{r}, t)$. Wyrażamy pole ψ przez $b_{\mathbf{k}}$ i zapisujemy równanie na amplitudy:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} b_{\mathbf{k}} &= \epsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \\ &+ \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} A_{\mathbf{l}, \mathbf{m}}^{\mathbf{k}} b_{\mathbf{l}} b_{\mathbf{m}} + (A_{\mathbf{l}, \mathbf{k}}^{\mathbf{m}} + A_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^{\mathbf{m}}) b_{\mathbf{l}}^* b_{\mathbf{m}} \\ &+ \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} (B_{\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}, \mathbf{l}, \mathbf{m}} + B_{\mathbf{l}, \mathbf{k}, \mathbf{m}}) b_{\mathbf{l}}^* b_{\mathbf{m}}^*, \end{aligned} \quad (3.45)$$

gdzie

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{m}, \mathbf{k}}^{\mathbf{l}} &= \frac{g\sqrt{N}}{V} \{u_{\mathbf{l}}(u_{\mathbf{m}} + v_{\mathbf{m}})u_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{l}} + v_{\mathbf{l}})v_{\mathbf{m}}u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{m}}(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})v_{\mathbf{l}}\} \delta_{\mathbf{l}, \mathbf{m}+\mathbf{k}}, \\ B_{\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{k}} &= \frac{g\sqrt{N}}{V} v_{\mathbf{l}}(u_{\mathbf{m}} + v_{\mathbf{m}})u_{\mathbf{k}} \delta_{-\mathbf{l}, \mathbf{m}+\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

Wyrazy zawierające $B_{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}}$ mogą zostać pominięte podczas obliczeń czasu zaniku $\gamma_{\mathbf{k}}^{-1}$ w drugim rzędzie rachunku zaburzeń, gdyż nie zachowują energii Bogoliubowa. Należałoby je uwzględnić w celu wyznaczenia przesunięcia w częstościach. W wyrazach zawierających współczynnik $A_{\mathbf{a}, \mathbf{b}}^{\mathbf{c}}$ można rozróżnić dwa procesy: Beliaev'a i Landaua. Wyraz $A_{\mathbf{l}, \mathbf{m}}^{\mathbf{k}}$ opisuje proces Beliaev'a, kiedy to w wyniku zderzenia cząstki skondensowanej z kwazicząstką o pędzie $\hbar\mathbf{k}$ pojawiają się dwie kwazicząstki o pędach różnych od zera. Natomiast wyraz $A_{\mathbf{l}, \mathbf{k}}^{\mathbf{m}} + A_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^{\mathbf{m}}$ opisuje proces Landaua, gdy w wyniku oddziaływania dwóch kwazicząstek o różnych pędach, pojawia się kwazicząstka o $k \neq 0$, oraz cząstka w kondensacie.

Wprowadzamy oznaczenie $b_{\mathbf{k}}(t) = \tilde{b}_{\mathbf{k}}(t) \exp(i\epsilon_{\mathbf{k}}t/\hbar)$. Rozwiązując równanie (3.45) do drugiego rzędu zależnego od czasu rachunku zaburzeń, otrzymujemy funkcje korelacji postaci:

$$\langle \tilde{b}_{\mathbf{k}}^*(t) \tilde{b}_{\mathbf{k}}(0) \rangle \approx n_{\mathbf{k}}(1 - \xi_{\mathbf{k}}), \quad (3.46)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \xi_{\mathbf{k}} = & \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \{ A_{\mathbf{l}, \mathbf{m}}^{\mathbf{k}} (A_{\mathbf{l}, \mathbf{m}}^{\mathbf{k}} + A_{\mathbf{m}, \mathbf{l}}^{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{l}} + n_{\mathbf{m}}) \mathcal{I}_t(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{l}} - \epsilon_{\mathbf{m}}) \\ & - (A_{\mathbf{l}, \mathbf{k}}^{\mathbf{m}} + A_{\mathbf{k}, \mathbf{l}}^{\mathbf{m}}) (n_{\mathbf{l}} - n_{\mathbf{m}}) \mathcal{I}_t(\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{l}} - \epsilon_{\mathbf{m}}) \}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

z

$$\mathcal{I}_t(\nu) = \int_0^t e^{i\nu\tau/\hbar} d\tau \int_0^\tau e^{-i\nu\tau'/\hbar} d\tau'. \quad (3.48)$$

Wyrażenie (3.46) jest równe dwóm pierwszym wyrazom rozwinięcia w szereg Taylora funkcji $n_{\mathbf{k}} \exp(-\xi_{\mathbf{k}})$. Poszczególne elementy $\xi_{\mathbf{k}}$ opisują:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \text{Re}[\xi_{\mathbf{k}}]/t - \text{charakterystyczny czas zaniku}, \quad (3.49)$$

$$\nu_{\mathbf{k}} = \text{Im}[\xi_{\mathbf{k}}]/t - \text{dodatkovą fazę}. \quad (3.50)$$

Wyraz $\gamma_{\mathbf{k}}$ nie zależy od t , gdyż dla bardzo małych czasów $\xi_{\mathbf{k}}$ jest liniowe.

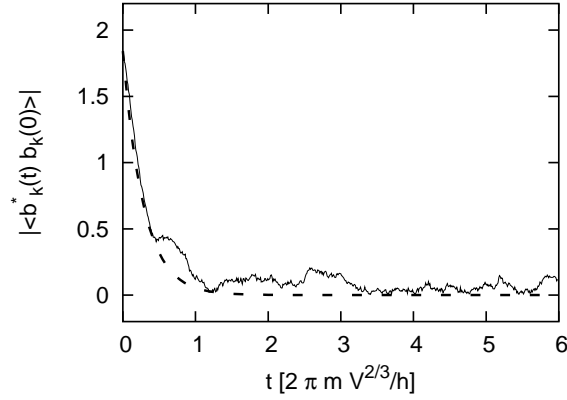
W celu oszacowania charakterystycznego czasu zaniku $\gamma_{\mathbf{k}}^{-1}$, należy numerycznie obliczyć $\xi_{\mathbf{k}}$ dla bardzo krótkich czasów i do części rzeczywistej otrzymanego wyniku dopasować linię prostą. Współczynnik nachylenia tej prostej jest równy $\gamma_{\mathbf{k}}$.

Na rysunku 3.5 przedstawiono funkcję korelacji $|\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(0) \rangle|$ obliczoną numerycznie (linia ciągła), oraz odpowiadający jej wynik otrzymany w rachunku zaburzeń (linia przerywana). Wynik rachunku zaburzeń dobrze modeluje eksperyment numeryczny. Sprawdziliśmy również, że zgodność jest dobra dla wszystkich modów leżących na losowo wybranej płaszczyźnie w przestrzeni pędów.

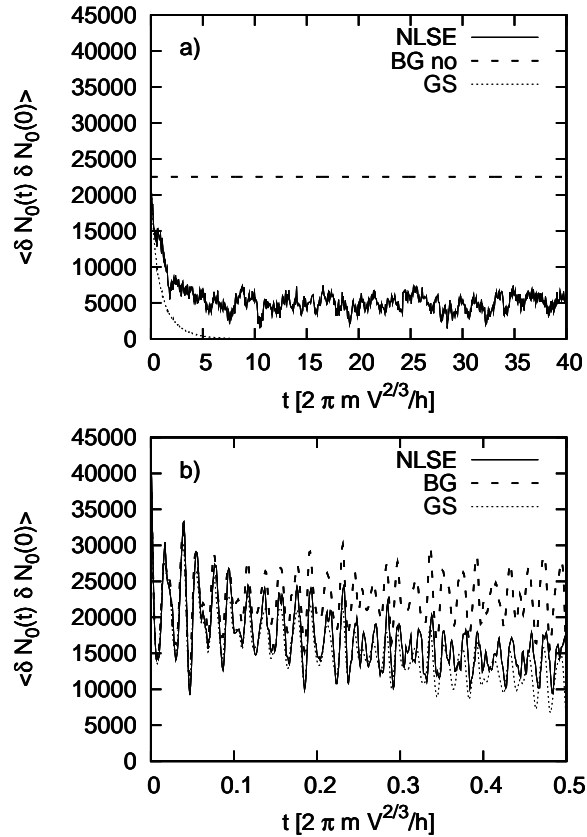
Dwuczasowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie po uwzględnieniu oddziaływania pomiędzy kwazicząstkami ma postać:

$$\langle \delta N_0(t) \delta N_0(0) \rangle_{GS} = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 e^{-2\gamma_{\mathbf{k}} t} \{ (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)^2 + 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 \cos(2\omega_{\mathbf{k}} t) \}. \quad (3.51)$$

Wynik ten różni się od wyniku otrzymanego w ramach modelu Bogoliubowa (3.41) jedynie obecnością czynnika tłumiącego. Na rysunku 3.6 przedstawiono zestawienie wyników symulacji numerycznych, przybliżenia Bogoliubowa i przybliżenia Bogoliubowa uwzględniającego czas zaniku kwazicząstek. Dla bardzo krótkich czasów model gaussowski wydaje się być obiecujący, lecz podobnie jak model Bogoliubowa podaje zły wynik dla długich czasów.



Rysunek 3.5: Funkcja korelacji $|\langle b_{\mathbf{k}}^*(t)b_{\mathbf{k}}(0) \rangle|$. Linia ciągła wynik symulacji numerycznych, linia przerywana – rachunku zaburzeń, dla modu $\mathbf{k} = \pi (2/l_x, 2/l_y, 3/l_z)$. Pozostałe parametry są takie same jak na rysunku 3.1.



Rysunek 3.6: Porównanie wyników symulacji numerycznych (NLSE – linia ciągła), modelu Bogoliubowa (BG – linia przerywana) i modelu gaussowskiego (GS – linia kropkowana). *a)* uśrednione po czasie $t = 0.1$ długoczasowe zachowanie funkcji porównane z BG (3.42), oraz GS (3.51), *b)* krótkoczasowe zachowanie funkcji zestawione z formułą BG (3.41) oraz GS (3.51).

Symulacje numeryczne wskazują, że dwuczasowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie nie zanika do zera dla długich czasów, podczas gdy dwupunktowe funkcje korelacji $\langle b_{\mathbf{k}}^*(t)b_{\mathbf{k}}(0) \rangle$ zanikają. Obydwa rozważane przybliżenia wyznaczają błędny długoczasowy wynik. Oznacza to, że istnieje pewien mechanizm, który nie pozwala na zanikanie dla długich czasów interesującej nas funkcji korelacji i nie jest dotychczas uwzględniony. Owy mechanizm odkrywają rachunki wykonane w ramach przybliżenia zakładającego ergodyczność dynamiki, które istotnie wyjaśnia powody nieskończonego czasu korelacji liczby atomów w kondensacie.

(iii) **Model ergodyczny.**

Zakładamy, że nieliniowa dynamika generowana przez NLSE jest ergodyczna, co przejawia się tym, że w granicy bardzo długich czasów trajektorie amplitud $b_{\mathbf{k}}(t)$ danej realizacji wypełniają jednorodnie powierzchnię stałej energii w przestrzeni fazowej. Takie założenie prowadzi do rozkładu prawdopodobieństwa zależnych od czasu amplitud:

$$P_{\infty}(\{b_{\mathbf{k}}(t)\}) = \delta \left(E - \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \epsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) \right), \quad (3.52)$$

gdzie energia E jest energią Bogoliubowa w chwili początkowej:

$$E = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \epsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*(0) b_{\mathbf{k}}(0). \quad (3.53)$$

W praktyce oznacza to, że obliczamy $\overline{N_{\perp}}(t \rightarrow \infty)$ po rozkładzie mikrokanonicznym (3.52), zaś pozostałe średnie tak jak poprzednio, po gaussowskim rozkładzie prawdopodobieństwa.

W pierwszym kroku obliczamy wartość oczekiwaną zależnej od czasu liczby atomów nieskondensowanych:

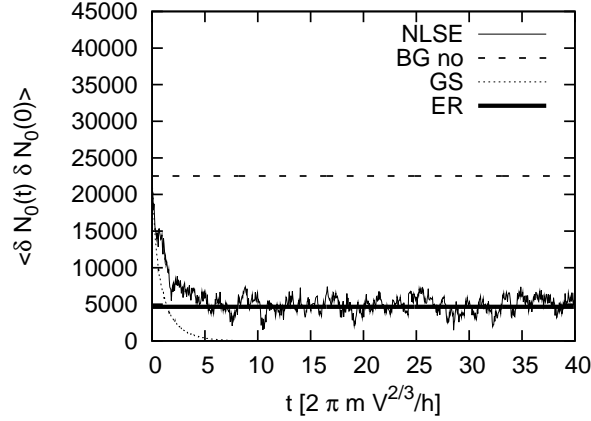
$$\overline{N_{\perp}}(t \rightarrow \infty) = \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) \langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) \rangle, \quad (3.54)$$

co sprowadza się do obliczenia funkcji:

$$\langle b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} db_{\mathbf{k}} P_{\infty}(\{b_{\mathbf{k}}(t)\}) b_{\mathbf{k}}^*(t) b_{\mathbf{k}}(t)}{\int_{-\infty}^{\infty} db_{\mathbf{k}} P_{\infty}(\{b_{\mathbf{k}}(t)\})}. \quad (3.55)$$

Zakładamy, że części rzeczywiste i urojone amplitud $b_{\mathbf{k}}$ są równomiernie rozłożone po całej sferze w przestrzeni o wymiarach $2\mathcal{M}$, gdzie $\mathcal{M} = N_x N_y N_z - 1$ jest liczbą modów z wyłączeniem modu zerowego. Wynikiem obliczeń jest średnia:

$$\overline{N_{\perp}}(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{\mathcal{M}} \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) \frac{E}{\epsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.56)$$



Rysunek 3.7: Długoczasowe zachowanie dwuczaskowej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie: NLSE – linia ciągła – symulacje numeryczne, BG – linia przerywana – model Bogoliubowa, GS – linia kropkowana – model gaussowski, oraz ER – gruba linia ciągła – model ergodyczny.

która poprzez energię E zależy od początkowych wartości amplitud $b_{\mathbf{k}}(0)$.

W drugim kroku uśredniamy $\langle \overline{N_{\perp}}(t \rightarrow \infty) N_{\perp}(0) \rangle$ po termicznym kanonicznym rozkładzie prawdopodobieństwa (3.18). Rachunki przeprowadzamy w taki sam sposób jak w modelu Bogoliubowa. Odejmując od obliczonej średniej wyraz $\langle N_{\perp}(0) \rangle^2$ otrzymujemy postać dwuczaskowej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie, w granicy długich czasów:

$$\langle \delta N_0(t \rightarrow \infty) \delta N_0(0) \rangle_{ER} = \frac{1}{\mathcal{M}} \left(\sum_{\mathbf{k} \neq 0} (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) n_{\mathbf{k}} \right)^2. \quad (3.57)$$

Rysunek 3.7 przedstawia zestawienie wyników symulacji numerycznych z wynikami analizy w ramach trzech przybliżeń: Bogoliubowa (BG), Bogoliubowa uwzględniającego skończony czas życia kwazicząstek (GS) oraz przybliżenia opartego na hipotezie ergodycznej (ER). Pełny opis funkcji korelacji, zarówno początkowy zanik jak i długoczasowe zachowanie, wyznaczają rachunki wykonane metodą pól klasycznych. Analiza w ramach metody Bogoliubowa pozwoliła na zrozumienie zachowania funkcji. Początkowy zanik jest związany ze skończonym czasem życia kwazicząstek Bogoliubowa, co jest wnioskiem płynącym z modelu gaussowskiego. Natomiast nieskończony czas korelacji liczby atomów w kondensacie istnieje na skutek fluktuacji energii od jednej realizacji pola do drugiej ze względu na zachowanie energii podczas ewolucji układu, co wyjaśniają rachunki wykonane w ramach przybliżenia opartego na hipotezie ergodycznej.

3.4.2 Dynamika wariancji fazy kondensatu

Równanie na dynamikę modu o zerowej energii wyznaczone jest w teorii kwantowej przez równanie Heisenberga. Po zastąpieniu operatorów przez zespolone amplitudy otrzymujemy równanie:

$$i\hbar \frac{\dot{a}_0}{a_0} = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{r}} dV (\psi_{\perp}(\mathbf{r})^2 + |\psi_{\perp}(\mathbf{r})|^2) + \frac{g}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{r}} \frac{\psi_{\perp}^*(\mathbf{r})\psi_{\perp}^2(\mathbf{r})}{\sqrt{N - N_{\perp}}}. \quad (3.58)$$

Zakładając, że frakcja kondensatu jest dominująca pomijamy wyrazy trzeciego rzędu w ψ_{\perp} :

$$i\hbar \frac{\dot{a}_0}{a_0} = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{r}} dV (\psi_{\perp}(\mathbf{r})^2 + |\psi_{\perp}(\mathbf{r})|^2). \quad (3.59)$$

Gdy zapiszemy amplitudę a_0 w postaci biegunowej, tj. $a_0(t) = |a_0(t)|e^{i\theta(t)}$, widzimy, że część rzeczywista równania (3.59) opisuje dynamikę fazy:

$$-\hbar\dot{\theta} = \text{Re} \left\{ \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{r}} dV (\psi_{\perp}(\mathbf{r})^2 + |\psi_{\perp}(\mathbf{r})|^2) \right\}, \quad (3.60)$$

podczas gdy część urojona wyznacza zmianę modu amplitudy:

$$i\hbar|\dot{a}_0| = |a_0| \text{Im} \left\{ \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{r}} dV (\psi_{\perp}(\mathbf{r})^2 + |\psi_{\perp}(\mathbf{r})|^2) \right\}. \quad (3.61)$$

Po pominięciu wyrazów oscylujących w czasie pochodna fazy, wyrażona przez amplitudy modów Bogoliubowa, wynosi:

$$\hbar\dot{\theta}_{\text{non osc}} = -\frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 |b_{\mathbf{k}}|^2. \quad (3.62)$$

Łatwo zauważyć, że wariancja fazy zależy od funkcji korelacji \mathcal{C} :

$$\text{Var } \varphi(t) = \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \mathcal{C}(|\tau - \tau'|), \quad (3.63)$$

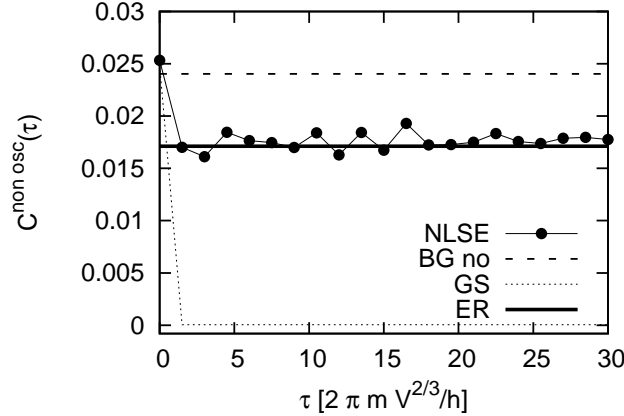
przy czym

$$\mathcal{C}(|\tau - \tau'|) = \langle \dot{\theta}(\tau)\dot{\theta}(\tau') \rangle - \langle \dot{\theta}(\tau) \rangle \langle \dot{\theta}(\tau') \rangle. \quad (3.64)$$

Zależność \mathcal{C} tylko od $|\tau - \tau'|$ jest bezpośrednim wynikiem czasowej niezmienniczości translacyjnej klasycznego pola. Korzystając z tej symetrii, zapisujemy wariancję fazy w postaci:

$$\text{Var } \varphi(t) = 2 \int_0^t (t - \tau) \mathcal{C}(\tau) d\tau, \quad (3.65)$$

z której łatwo odczytać jaki wpływ na dynamikę wariancji fazy ma funkcja $\mathcal{C}(\tau)$. Jeśli $\mathcal{C}(\tau)$ dąży do zera wystarczająco szybko gdy $\tau \rightarrow \infty$, wtedy wariancja fazy rośnie liniowo w czasie. Natomiast gdy $\mathcal{C}(\tau)$ jest niezerowa w granicy dużych czasów, wtedy $\text{Var } \varphi$ jest kwadratową funkcją czasu.



Rysunek 3.8: Funkcja korelacji \mathcal{C} . Zestawienie wyników symulacji numerycznych (punkty, linia ciągła dodana dla prowadzenia oka), oraz wyników analitycznych w ramach modelu Bogoliubowa – BG, modelu gaussowskiego – GS i modelu ergodycznego – ER. Parametry symulacji: $T = 0.171T_c$, $N = 4 \times 10^5$ oraz $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

Wyznaczona na podstawie (3.62) funkcja korelacji $\mathcal{C}(\tau)$ przedstawiona jest na rysunku 3.8. Początkowy zanik $\mathcal{C}(\tau)$ związany jest ze skończonym czasem życia kwazicząstek. Tak jak w przypadku funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie, mechanizm związany z zachowaniem energii nie pozwala na zanikanie funkcji $\mathcal{C}(\tau)$ do zera.

W celu wyznaczenia postaci wariancji fazy należy obliczyć funkcję korelacji $\mathcal{C}(\tau)$, zakładając, że $\dot{\theta}$ dana jest przez (3.62). Obliczenia przebiegają analogicznie jak w poprzednim podrozdziale. Poniżej zestawiono wyniki rachunków analitycznych w ramach rozważanych trzech modeli.

(i) **Model Bogoliubowa.** Zakładając gaussowski rozkład prawdopodobieństwa i stosując twierdzenie Wick’a otrzymujemy:

$$\text{Var } \varphi(t)_{\text{BG}} = \left(\frac{g}{\hbar V} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^4 n_{\mathbf{k}}^2 \left[t^2 + \frac{\sin^2 \omega_{\mathbf{k}} t}{(2\omega_{\mathbf{k}})^2} \right]. \quad (3.66)$$

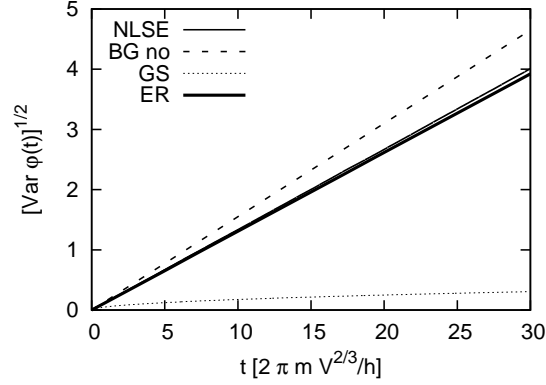
Model Bogoliubowa odtwarza kwadratową zależność wariancji fazy od czasu, rysunek 3.9. Przewidywania dotyczące współczynnika proporcjonalności przy T^2 jest niepoprawne, zwłaszcza dla wyższych temperatur (patrz rys. 3.11).

W przybliżeniu Bogolibowa, rozważaliśmy również funkcję korelacji amplitudy a_0 . Pomijając oscylacje modu zerowego możemy założyć, że:

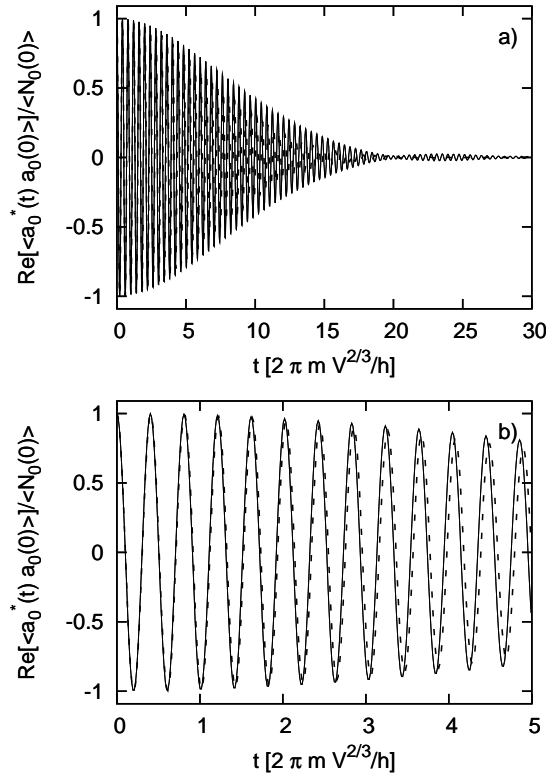
$$\langle a_0^*(t) a_0(0) \rangle_{\text{BG}} \simeq \langle N_0 \rangle \langle e^{-i\theta(t)} \rangle. \quad (3.67)$$

Wprowadzamy oznaczenie $A = \langle e^{-i\theta(t)} \rangle$, oraz oznaczamy fazę kondensatu θ (3.62) jako:

$$\theta(t)_{\text{non osc}} = - \sum_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}}, \quad (3.68)$$



Rysunek 3.9: Pierwiastek z wariancji fazy kondensatu w funkcji czasu. Zestawienie wyników symulacji numerycznych (NLSE – linia ciągła) z wynikami rachunków analitycznych otrzymanych w ramach modelu Bogoliubowa (BG – linia przerywana), modelu gaussowskiego (GS – linia kropkowana) oraz modelu ergodycznego (ER – szeroka linia). Parametry symulacji: $T = 0.171T_c$, $N = 4 \times 10^5$ oraz $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.



Rysunek 3.10: Część rzeczywista dwuczasowej funkcji korelacji amplitudy modu o zerowym pędzie: linia ciągła oznacza wynik symulacji numerycznych, podczas gdy linia przerywana zadana jest formułą (3.71) otrzymaną w ramach przybliżenia Bogoliubowa. (a) długoczasowe zachowanie i (b) krótkoczasowe zachowanie. Parametry symulacji wynoszą: $T = 0.171T_c$, $N = 4 \times 10^5$ oraz $gN/V = 700\hbar^2/mV^{2/3}$.

gdzie

$$\theta_{\mathbf{k}} = t \frac{g}{V} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 (x_{\mathbf{k}}^2 + y_{\mathbf{k}}^2). \quad (3.69)$$

Używamy oznaczeń wprowadzonych w przykładzie 3. Funkcję A wyznacza całka:

$$A = \int \left(\prod_{\mathbf{k}} dx_{\mathbf{k}} dy_{\mathbf{k}} \right) \left(\prod_{\mathbf{k}} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \right) \left(\prod_{\mathbf{k}} P(\{x_{\mathbf{k}} + iy_{\mathbf{k}}\}) \right). \quad (3.70)$$

Ze względu na iloczyn funkcji podcałkowych różnych argumentów funkcję A można zapisać jako iloczyn całek. Obliczając w ten sposób całki gaussowskie otrzymujemy:

$$\langle a_0^*(t) \hat{a}_0(0) \rangle_{\text{BG}} \simeq \langle N_0 \rangle \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{1 + i \frac{g}{\hbar V} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 n_{\mathbf{k}} t}. \quad (3.71)$$

Rysunek 3.10 przedstawia wyniki symulacji numerycznych, oraz wynik otrzymany w ramach przybliżenia Bogoliubowa. Należy zwrócić uwagę, że już dla czasów rzędu $t = 20$ korelacja amplitudy kondensatu zanika. Dokładnie dla tych samych czasów wariancja fazy ma wartość rzędu π (rysunek 3.9).

(i) **Model gaussowski.** Wychodząc poza model Bogoliubowa, poprzez uwzględnienie skończonego czasu życia kwazicząstek, otrzymujemy liniową zależność wariancji fazy:

$$\text{Var } \varphi(t)_{\text{GS}} = \left(\frac{g}{\hbar V} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^4 n_{\mathbf{k}}^2 \left[\frac{e^{-2\gamma_{\mathbf{k}} t} - 1}{2\gamma_{\mathbf{k}}^2} + \frac{t}{\gamma_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (3.72)$$

Przewidywania modelu gaussowskiego nie są zgodne z wynikami numerycznymi, rysunek 3.9.

(iii) **Model ergodyczny.** Długoczasowe zachowanie funkcji korelacji \mathcal{C} obliczone zgodnie z ergodycznym rozkładem prawdopodobieństwa wyznacza wariancję fazy postaci:

$$\text{Var } \varphi(t \rightarrow +\infty)_{\text{ER}} = t^2 \left(\frac{g}{\hbar V} \right)^2 \frac{1}{\mathcal{M}} \left(\sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2 n_{\mathbf{k}} \right)^2. \quad (3.73)$$

Przewidywania modelu ergodycznego bardzo dobrze modelują długoczasowe zachowanie wariancji fazy kondensatu.

Na rysunku 3.9 zestawiono wyniki symulacji numerycznych i wyników rachunków analitycznych. Mechanizm rządzący dynamiką fazy jest taki sam jak w przypadku dwuczasowej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie. Ze względu na zachowanie energii podczas ewolucji układu, funkcja korelacji \mathcal{C} nie zanika do zera dla długich czasów, co ma bezpośredni wpływ na kwadratową czasową zależność wariancji fazy kondensatu.

Zależność od temperatury

Zarówno metodą pól klasycznych, jak i metodą Bogoliubowa wyznaczyliśmy temperaturowe zależności poszczególnych funkcji. W prezentowanych formułach, otrzymanych w ramach trzech modeli, zależność od temperatury jest ukryta w osadzeniach modów $n_{\mathbf{k}} = k_B T / \epsilon_{\mathbf{k}}$. Poniżej przepisujemy formuły (3.42), (3.57), (3.66), oraz (3.73) z jawną zależnością od temperatury.

W przybliżeniu Bogoliubowa pokazaliśmy, że dwuczасowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie jest kwadratową funkcją temperatury:

$$\langle \delta N_{\perp}(t) \delta N_{\perp}(0) \rangle_{BGno} = \mathcal{K} (k_B T)^2. \quad (3.74)$$

W ramach modelu Bogoliubowa obliczony współczynnik wynosi:

$$\mathcal{K}_{BGno} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^2, \quad (3.75)$$

natomiast wyznaczony w modelu ergodycznym współczynnik \mathcal{K} ma postać:

$$\mathcal{K}_{ER} = \frac{1}{\mathcal{M}} \left(\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^2. \quad (3.76)$$

Podobnie wykazaliśmy, że wariancja fazy kondensatu jest kwadratową funkcją temperatury:

$$\frac{\text{Var } \varphi(t)}{t^2} = \mathcal{W} (k_B T)^2. \quad (3.77)$$

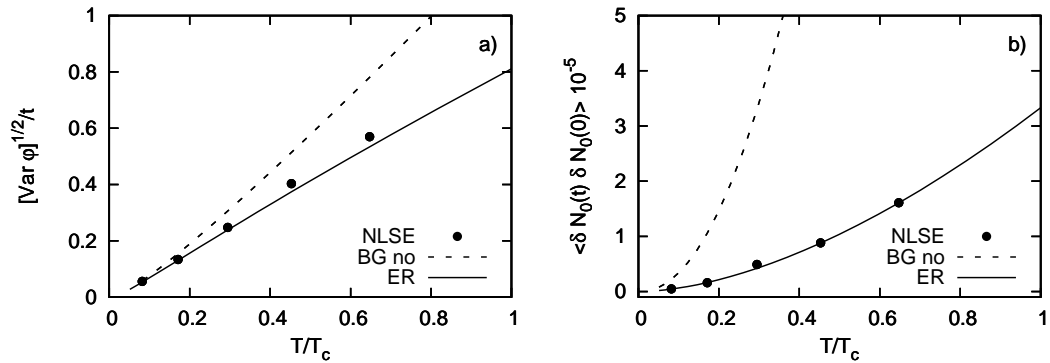
Rachunki w ramach modelu Bogoliubowa wyznaczają:

$$\mathcal{W}_{BGno} = \left(\frac{g}{\hbar V} \right)^2 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(\frac{(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^2, \quad (3.78)$$

a w modelu ergodycznym:

$$\mathcal{W}_{ER} = \left(\frac{g}{\hbar V} \right)^2 \frac{1}{\mathcal{M}} \left(\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}})^2}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \right)^2. \quad (3.79)$$

Na rysunku 3.11 pokazane jest długoczasowe zachowanie interesujących nas wielkości: *a*) wariancji fazy skalowanej przez czas, oraz *b*) dwuczасowej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie. Obie wielkości przedstawiono w funkcji temperatury unormowanej do temperatury krytycznej gazu doskonałego. Zestawiono wyniki symulacji numerycznych (punkty), oraz rachunków analitycznych wykonanych w ramach modelu Bogoliubowa (BG) i modelu ergodycznego (ER). Model ergodyczny doskonale przewiduje długoczasowe zachowanie obu wielkości nawet dla temperatur bliskich temperatury krytycznej, podczas gdy model Bogoliubowa może być rozważany tylko w przypadku temperatur bardzo małych w porównaniu z T_c . Dla wyższych temperatur model Bogoliubowa nie jest już poprawany.



Rysunek 3.11: Długoczasowe zachowanie: a) pierwiastka z wariacji fazy skalowanego przez czas, b) dwuczasewej funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie. Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych (NLSE), linia przerywana to wyniki modelu Bogoliubowa pomijającego wyrazy oscylujące w czasie (BR no), a linia ciągła oznacza wynik modelu ergodycznego (ER).

Uwagi

1. Zastosowana w tym rozdziale implementacja metody pól klasycznych różni się od opisanej we wprowadzeniu. Główne różnice, to parametry kontroli oraz sposób uśredniania. W przypadku rozważanych zależnych od czasu funkcji, taka forma implementacji jest wygodniejsza. Sprawdziliśmy, że obie implementacje wyznaczają porównywalne wartości: temperatury, liczby atomów i obsadzeń modów.
2. Rachunki przedstawione w tym rozdziale pokazują jak istotna była analiza funkcji korelacji liczby atomów w kondensacie. Badanie jej własności pozwoliło ustalić mechanizm odpowiadających za dynamikę odpowiednich funkcji korelacji. Zachowanie energii podczas ewolucji układu wprowadza pewne korelacje między amplitudami różnych modów, co nie pozwala na znikanie funkcji korelacji dla długich czasów. Wykrycie tego mechanizmu byłoby niezwykle trudne gdyby analiza została ograniczona tylko do wariacji fazy, ponieważ model Bogoliubowa również odtwarza jej kwadratową zależność od czasu.

4 Naładowane nieliniowe pole Kleina–Gordona

Zauważyliśmy już we wprowadzeniu, że w przypadku makroskopowego obsadzenia modów argumenty uzasadniające opis gazu bozonowego przez klasyczne pole są dość ogólne i stosują się do każdego pola bozonowego niezależnie od rodzaju oddziaływania, lub równań dynamicznych. W tym rozdziale przedstawiamy niestandardowe zastosowanie metody pól klasycznych do opisu relatywistycznego gazu Bosego. W praktyce, oznacza to badanie rozwiązań nieliniowego równania Kleina–Gordona szeroko stosowanego w modelach teorii pola [42], gdzie główną techniką badawczą jest metoda całek po trajektoriach.

Zadanie analizy termodynamicznych własności pola Kleina–Gordona zostało podjęte przez wielu autorów, zarówno w przypadku nieoddziałującym [43], jak i z uwzględnieniem oddziaływania pomiędzy cząstkami [44]–[49]. W obu przypadkach zostało pokazane, że w obszarze niskich temperatur istnieje kondensat Bosego–Einsteina. Dlatego metoda pól klasycznych wydaje się być odpowiednią techniką do badania termicznych własności tego układu.

W niniejszym rozdziale badamy dynamikę nieliniowego pola Kleina–Gordona w stanie równowagi termodynamicznej. Rozważamy przypadek, w którym całkowity ładunek jest dodatni, co oznacza, że liczba cząstek jest większa od liczby antycząstek. W pierwszej części rozdziału stosujemy procedurę Bogoliubowa do opisu układu w temperaturze zerowej. W drugiej części, używając metody pól klasycznych, analizujemy zależność od temperatury pewnych fizycznych wielkości. Na podstawie analizy widma wzbudzeń i temperaturowych zależności ładunku w modzie o zerowej energii, oraz potencjału chemicznego, pokazujemy, że wyniki numeryczne uzyskane metodą pól klasycznych są zgodne z wynikami otrzymanymi przez innych autorów [44, 45]. Zatem, stosujemy metodę pól klasycznych do badania innych fizycznych obserwacji, takich jak ładunek cząstek, lub fluktuacje ładunku w stanie o najniższej energii.

4.1 Model

W rozdziale tym badamy pole $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ opisujące bezspinowe oddziałujące relatywistyczne bozony. W rozważnym modelu, oddziaływanie pomiędzy cząstkami opisujemy przez nieliniowy wyraz $\lambda \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi}$, gdzie λ jest stałą sprzężenia. Na pole $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ nakładamy periodyczne warunki brzegowe, oraz stosujemy

jednostki, w których $\hbar = c = 1$ ¹.

W celu zrozumienia głównych cech pola Kleina–Gordona analizujemy dynamikę pola nieoddziałującego².

Pędy kanonicznie sprzężone do pól $\hat{\Psi}$ i $\hat{\Psi}^\dagger$ mają postać [50]:

$$\hat{\Pi}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \dot{\hat{\Psi}}^\dagger, \quad (4.1)$$

$$\hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \dot{\hat{\Psi}}, \quad (4.2)$$

gdzie kropka symbolizuje pochodną czasową. Pole oraz pędy kanonicznie sprzężone spełniają następujące reguły komutacyjne:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] = 0, \quad (4.3)$$

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}(\mathbf{r}', t) \right] = i 2m \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.4)$$

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \right] = 0, \quad (4.5)$$

$$\left[\hat{\Pi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}^\dagger(\mathbf{r}', t) \right] = 0, \quad (4.6)$$

$$\left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}(\mathbf{r}', t) \right] = 0, \quad (4.7)$$

$$\left[\hat{\Pi}(\mathbf{r}, t), \hat{\Pi}(\mathbf{r}', t) \right] = 0. \quad (4.8)$$

Hamiltonian układu jest całką:

$$\hat{H} = \int_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{H}} d^3\mathbf{r}, \quad (4.9)$$

gdzie gęstość hamiltonianu $\hat{\mathcal{H}}$ wynosi:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left((2m)^2 \hat{\Pi} \hat{\Pi}^\dagger + \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi} + m^2 \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \right), \quad (4.10)$$

$\nabla_{\mathbf{r}}$ oznacza trójwymiarowy gradient. Hamiltonian \hat{H} generuje dynamikę opisaną równaniem Kleina–Gordona:

$$\ddot{\hat{\Psi}} = \Delta_{\mathbf{r}} \hat{\Psi} - m^2 \hat{\Psi}, \quad (4.11)$$

$\Delta_{\mathbf{r}}$ jest laplasjanem. Równanie (4.11) posiada nieskończenie wiele stałych ruchu, lecz dwie z nich są szczególnie ważne. Są to całkowita energia wyznaczona przez hamiltonian \hat{H} , oraz ładunek \hat{Q} :

$$\hat{Q} = \int_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{Q}} d^3\mathbf{r}, \quad (4.12)$$

¹Poszczególne wielkości mierzone są w jednostkach: 1) długość $\tilde{\mathbf{r}} = V^{1/3} \mathbf{r}$, 2) czas $\tilde{t} = tV^{1/3}/c$, 3) pole $\tilde{\Psi} = \Psi/\sqrt{V}$, 4) masa $\tilde{m} = \hbar m/cV^{1/3}$, 5) $\tilde{\Lambda} = \lambda V^{1/3}$, oraz energia $\tilde{H} = H\hbar c/V^{1/3}$, gdzie: \mathbf{r} , t , Ψ , m , λ i H są bezwymiarowe.

²Przypadek liniowy jest zagadnieniem podręcznikowym i został opisany n.p. w [50, 51].

gdzie \hat{Q} oznacza gęstość ładunku:

$$\hat{Q} = \frac{i}{2m} \left(\hat{\Psi}^\dagger \dot{\hat{\Psi}} - \dot{\hat{\Psi}} \hat{\Psi}^\dagger \right). \quad (4.13)$$

W celu nadania fizycznego znaczenia ładunkowi, należałoby wprowadzić np. sprzężenie z polem elektromagnetycznym, wtedy \hat{Q} można zidentyfikować jako ładunek elektryczny. Pole $\hat{\Psi}$ może jednak opisywać elektrycznie neutralne cząstki i antycząstki [52]. Wówczas, zachowany ładunek jest równy różnicy pomiędzy liczbą cząstek i antycząstek, co zostanie pokazane poniżej.

Rozwiązanie równania Kleina-Gordona w bazie fal płaskich ma postać:

$$\hat{\Psi}_L(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{m}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\hat{a}_+(\mathbf{k}) e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + \hat{a}_-^\dagger(-\mathbf{k}) e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.14)$$

gdzie

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2} \quad (4.15)$$

jest energią wzbudzeń, podczas gdy $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ jest bezwymiarowym wektorem falowym ograniczonym do pierwszej strefy Brillouin'a: $k_i \in [-\pi/L_i, \pi/L_i[$, i oznacza różne składowe przestrzenne. $\hat{a}_+(\mathbf{k})$ jest operatorem anihilacji cząstki o pędzie \mathbf{k} , natomiast $\hat{a}_-^\dagger(-\mathbf{k})$ jest operatorem kreacji antycząstki o pędzie $-\mathbf{k}$. Operatory cząstek \hat{a}_+ ewoluują z dodatnią częstością, a operatory antycząstek \hat{a}_-^\dagger z częstością ujemną. Najniższa dostępna energia dla cząstek jest równa masie m , podczas gdy najwyższa dostępna energia dla antycząstek wynosi $-m$. Operatory anihilacji cząstek \hat{a}_+ i antycząstek \hat{a}_- spełniają bozonowe reguły komutacyjne:

$$[\hat{a}_+(\mathbf{k}), \hat{a}_+^\dagger(\mathbf{l})] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}}, \quad (4.16)$$

$$[\hat{a}_-(\mathbf{k}), \hat{a}_-^\dagger(\mathbf{l})] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{l}}, \quad (4.17)$$

a wszystkie pozostałe komutatory są równe zero. Operatory liczby cząstek i antycząstek w modzie \mathbf{k} wynoszą odpowiednio: $\hat{n}_{\mathbf{k}}^P = \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+$ i $\hat{n}_{\mathbf{k}}^A = \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-$.

Hamiltonian wyrażony przez (4.14) ma postać:

$$\hat{H}_L = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}}^P + \hat{n}_{\mathbf{k}}^A), \quad (4.18)$$

zatem całkowita energia jest sumą energii obu typów wzbudzeń: cząstek i antycząstek. Wyrażony przez (4.14) ładunek wynosi:

$$\hat{Q}_L = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}}^P - \hat{n}_{\mathbf{k}}^A). \quad (4.19)$$

Powyższa postać ładunku ma następującą interpretację. Cząstki posiadają ładunek dodatni, przy czym każde cząstkowe wzbudzenie ma ładunek $+1$, natomiast antycząstki mają ładunek ujemny, a każde ich wzbudzenie niesie ze sobą

ładunek równy -1 . Zgodnie z równaniami (4.16), (4.17), (4.18), oraz (4.19) kwanty o ładunku ± 1 występują w tej teorii symetrycznie. Zmiana znaku ładunku jest równoważna zamianie cząstek na antycząstki.

Wprowadzenie oddziaływania nie zmienia postaci pędów kanonicznie sprzężonych (4.1-4.2) oraz komutatorów pola (4.3-4.8).

Zgodnie z założoną nieliniowością, gęstość hamiltonianu oddziałującego pola ma postać:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left((2m)^2 \hat{\Pi} \hat{\Pi}^\dagger + \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi} + m^2 \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} + \frac{\lambda}{2} \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \right), \quad (4.20)$$

a dynamika zgodna z hamiltonianem $\hat{H} = \int_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{H}} d^3\mathbf{r}$ jest opisana przez nieliniowe równanie Kleina-Gordona (NLKGE):

$$\ddot{\hat{\Psi}} = \Delta_{\mathbf{r}} \hat{\Psi} - m^2 \hat{\Psi} - \lambda \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi}. \quad (4.21)$$

Nieliniowe równanie Kleina–Gordona ma dwie stałe ruchu: energię z gęstością hamiltonianu (4.20), oraz ładunek z gęstością ładunku (4.13).

W niniejszej pracy rozważamy sytuację, w której ładunek jest różny od zera. Dla ustalenia uwagi zakładamy, że całkowity ładunek jest dodatni co nie ogranicza ogólności, gdyż zmiana znaku ładunku jest równoważna zamianie cząstek na antycząstki.

4.2 Metoda Bogoliubowa: opis w temperaturze zerowej

Zakładamy, że poniżej pewnej temperatury krytycznej pojawia się kondensat Bosego–Einsteina. Opisujemy ten stan w przybliżeniu Bogoliubowa, w temperaturze $T = 0$.

Poszukujemy rozwiązania nieliniowego równania Kleina–Gordona w postaci:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left(\phi_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right) e^{-i\mu t}, \quad (4.22)$$

gdzie ϕ_0 jest klasycznym polem, μ jest stałą częstością, którą nazywamy potencjałem chemicznym, natomiast $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem. Zakładamy, że ϕ_0 ma dominujący wkład do pola $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$. W celu wyznaczenia przybliżonej dynamiki pola stosujemy procedurę linearyzacji równań.

Wyrażamy nieliniowe równanie Kleina–Gordona przez opisany powyżej analtz (4.22) i rozwijamy nieliniowość do wyrazów liniowych w $\hat{A}_{\mathbf{k}}(t)$. Ze względu na to, że równanie ruchu spełnione jest w każdej chwili czasu, porównujemy wyrazy z taką samą zależnością czasową. W ten sposób otrzymujemy dwa równania. Pierwsze z nich pozwala wyznaczyć potencjał chemiczny:

$$\mu^2 = m^2 + \lambda |\phi_0|^2, \quad (4.23)$$

podczas gdy drugie wyznaczają dynamikę $\hat{A}_{\mathbf{k}}$:

$$\ddot{\hat{A}}_{\mathbf{k}}(t) = 2i\mu\dot{\hat{A}}_{\mathbf{k}}(t) - L_{\mathbf{k}}\hat{A}_{\mathbf{k}}(t) - \lambda\phi_0^2\hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t). \quad (4.24)$$

gdzie kropka symbolizuje pochodną czasową, a $L_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2 + \lambda|\phi_0|^2$. Analogicznie otrzymujemy równanie na $\hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger$. Te dwa równania drugiego rzędu są równoważne układowi czterech równań pierwszego rzędu na amplitudy $\hat{A}_{\mathbf{k}}(t), \hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t), \dot{\hat{A}}_{\mathbf{k}}(t), \dot{\hat{A}}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t)$.

4.2.1 Widmo elementarnych wzbudzeń

W celu skrócenia opisu wprowadzamy oznaczenie:

$$\hat{Y}_{\mathbf{k}}(t) = \begin{pmatrix} \hat{A}_{\mathbf{k}}(t) \\ \hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t) \\ \dot{\hat{A}}_{\mathbf{k}}(t) \\ \dot{\hat{A}}_{-\mathbf{k}}^\dagger(t) \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

Zależność czasowa $\hat{Y}_{\mathbf{k}}$ wyznaczona jest przez równanie:

$$\frac{d\hat{Y}_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = \mathcal{M}_{\mathbf{k}}\hat{Y}_{\mathbf{k}}(t), \quad (4.26)$$

gdzie $\mathcal{M}_{\mathbf{k}}$ jest macierzą:

$$\mathcal{M}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -L_{\mathbf{k}} & -\lambda\phi_0^2 & 2i\mu & 0 \\ -\lambda\phi_0^2 & -L_{\mathbf{k}} & 0 & -2i\mu \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Warunek znikania wyznacznika: $\det(\mathcal{M}_{\mathbf{k}} - i\omega_{\mathbf{k}}\mathbf{I}) = 0$, (\mathbf{I} jest macierzą jednostkową) prowadzi do równania charakterystycznego:

$$(\omega_{\mathbf{k}}^2 - 2\mu\omega_{\mathbf{k}} - L_{\mathbf{k}})(\omega_{\mathbf{k}}^2 + 2\mu\omega_{\mathbf{k}} - L_{\mathbf{k}}) = (\lambda|\phi_0|^2)^2. \quad (4.28)$$

Powyższe równanie, dla każdego modu \mathbf{k} , ma dwa rozwiązania:

$$\begin{aligned} \omega_1(\mathbf{k})^2 &= \mathbf{k}^2 + 2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2 - \\ &- \sqrt{\mathbf{k}^2 4(m^2 + \lambda|\phi_0|^2) + (2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2)^2}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

oraz

$$\begin{aligned} \omega_2(\mathbf{k})^2 &= \mathbf{k}^2 + 2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2 + \\ &+ \sqrt{\mathbf{k}^2 4(m^2 + \lambda|\phi_0|^2) + (2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2)^2}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Istnienie dwóch rozwiązań oznacza, że w naszym modelu są dwa rodzaje wzbudzeń, pierwsze z częstością ω_1 i drugie z częstością ω_2 . Różnica we wzorach na

ω_1 i ω_2 sprowadza się jedynie do różnicy w znaku, ale ma ważne fizyczne konsekwencje.

W granicy długofalowej, gdy $\mathbf{k} \rightarrow 0$, częstość $\omega_1(\mathbf{k})$ wynosi:

$$\omega_1(\mathbf{k}) \cong \mathbf{k}v_s, \quad (4.31)$$

gdzie

$$v_s = \left(\frac{\lambda|\phi_0|^2}{2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2} \right)^{1/2}. \quad (4.32)$$

Relacja dyspersyjna $\omega_1 \cong \mathbf{k}v_s$ odpowiada wzbudzeniom fononowym (bezmasowe fonony) poruszającym się z prędkością dźwięku v_s . Drugie rozwiązanie (4.30) w granicy długofalowej ma postać:

$$\omega_2(\mathbf{k}) \cong \left(\mathbf{k}^2 \frac{m^2 + \lambda|\phi_0|^2}{(2m^2 + 3\lambda|\phi_0|^2)^2} + 1 \right) \sqrt{4m^2 + 6\lambda|\phi_0|^2}. \quad (4.33)$$

Ta relacja dyspersyjna charakteryzuje masywne cząstki. Dla pędu $\mathbf{k} = 0$ częstości własne wynoszą: $\omega_1(0) = 0$ i $\omega_2(0) = \sqrt{4m^2 + 6\lambda|\phi_0|^2}$.

W granicy krótkofalowej ($k \rightarrow \infty$), energie wzbudzeń ω_1 i ω_2 są liniowymi funkcjami \mathbf{k} :

$$\omega_1(\mathbf{k}) \cong |\mathbf{k}| - \mu, \quad (4.34)$$

$$\omega_2(\mathbf{k}) \cong |\mathbf{k}| + \mu, \quad (4.35)$$

podobnie jak dla nieoddziałujących relatywistycznych bozonów.

Obliczone w przybliżeniu Bogoliubowa widma elementarnych wzbudzeń są zgodne z wynikami rachunków otrzymanych metodą całek po trajektoriach w tym samym rzędzie rozwinięcia [44].

4.2.2 Operator pola

Biorąc pod uwagę wyniki poprzedniego podrozdziału, zapisujemy operator $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ jako superpozycję:

$$\hat{A}_{\mathbf{k}}(t) = \hat{a}_{\mathbf{k}}e^{-i\omega_1(\mathbf{k})t} + \hat{b}_{\mathbf{k}}e^{i\omega_1(\mathbf{k})t} + \hat{c}_{\mathbf{k}}e^{-i\omega_2(\mathbf{k})t} + \hat{d}_{\mathbf{k}}e^{i\omega_2(\mathbf{k})t}, \quad (4.36)$$

gdzie $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, $\hat{b}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}$, $\hat{d}_{\mathbf{k}}$ są pewnymi operatorami, natomiast $\omega_1(\mathbf{k})$ i $\omega_2(\mathbf{k})$ są dodatnie.

Zwróćmy szczególną uwagę na mod o zerowej energii. Z rachunków analitycznych wiemy, że $\omega_1(0) = 0$, więc wyrazy \hat{a}_0 , \hat{b}_0 nie zależą od czasu. Ponieważ niezależny od czasu wkład do pola jest już uwzględniony w ϕ_0 , dlatego kładziemy:

$$\hat{a}_0 = 0, \quad (4.37)$$

$$\hat{b}_0 = 0. \quad (4.38)$$

Jeżeli $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ (4.36) jest rozwiązaniem równania (4.24), to muszą być spełnione następujące zależności:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \gamma_1(\mathbf{k}) \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad \text{gdzie } \gamma_1(\mathbf{k}) = \frac{\lambda \phi_0^2}{\omega_1^2 - 2\mu\omega_1 - L_{\mathbf{k}}}, \quad (4.39)$$

$$\hat{c}_{\mathbf{k}} = \gamma_2(\mathbf{k}) \hat{d}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad \text{gdzie } \gamma_2(\mathbf{k}) = \frac{\lambda \phi_0^2}{\omega_2^2 + 2\mu\omega_2 - L_{\mathbf{k}}}. \quad (4.40)$$

Po ich uwzględnieniu $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ przyjmuje postać:

$$\hat{A}_{\mathbf{k}}(t) = \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_1 t} + \gamma_1 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_1 t} + \hat{d}_{\mathbf{k}} e^{i\omega_2 t} + \gamma_2 \hat{d}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\omega_2 t}. \quad (4.41)$$

W celu zachowania fizycznych własności pola, z wielu możliwych postaci operatorów $\hat{a}_{\mathbf{k}}$, $\hat{d}_{\mathbf{k}}$ wybieramy te, które zachowują komutatory (4.3-4.8) w każdej chwili czasu. Wstawiając do komutatorów pole (4.22), z $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ zadany wzorem (4.41), widzimy, że jedynie trzy komutatory (4.3), (4.4), (4.6) dają nietrywialne równania zbudowane z różnych kombinacji komutatorów $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{d}_{\mathbf{k}}$.

Wprowadźmy przeskalowane operatory $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \quad (4.42)$$

$$\hat{d}_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \quad (4.43)$$

gdzie $f_{\mathbf{k}}$ oraz $g_{\mathbf{k}}$ są pewnymi gładkimi funkcjami, przy czym f_0 musi być równe zero ze względu na (4.37):

$$f_0 = 0. \quad (4.44)$$

Jeśli założymy, że nowe operatory spełniają bozonowe reguły komutacyjne $[\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = [\hat{\beta}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ oraz $[\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0$, to możliwe jest jednoznaczne wyznaczenie funkcji $f_{\mathbf{k}}$ i $g_{\mathbf{k}}$, oraz pełnej postaci operatora pola.

Po uwzględnieniu bozonowych reguł komutacyjnych na $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ komutatory pola (4.3), (4.4) oraz (4.6) dają dwa niezależne równania:

$$z_{\mathbf{k}} - l_{\mathbf{k}} = 0, \quad (4.45)$$

$$\mu(z_{\mathbf{k}} - l_{\mathbf{k}}) + z_{\mathbf{k}} \frac{L_{\mathbf{k}} - \omega_1^2}{2\mu} - l_{\mathbf{k}} \frac{L_{\mathbf{k}} - \omega_2^2}{2\mu} = 2m, \quad (4.46)$$

gdzie $z_{\mathbf{k}} = |f_{\mathbf{k}}|^2(1 - |\gamma_1(\mathbf{k})|^2)$, oraz $l_{\mathbf{k}} = |g_{\mathbf{k}}|^2(1 - |\gamma_2(\mathbf{k})|^2)$.

Równanie (4.45) wyznacza $z_{\mathbf{k}} = l_{\mathbf{k}}$, wówczas z równania (4.46) otrzymujemy:

$$z_{\mathbf{k}} = \frac{4m\mu}{\omega_2^2 - \omega_1^2}. \quad (4.47)$$

Uwzględniając ten wynik, pole w przestrzeni pędów $\hat{\Psi}(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ przyjmuje następującą postać dla modu o zerowym pędzie $\mathbf{k} = 0$:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{k} = 0, t) = \phi_0 e^{-i\mu t} + g_0 (\hat{\beta}_0^\dagger e^{-i(\mu - \omega_2)t} + \gamma_2 \hat{\beta}_0 e^{-i(\mu + \omega_2)t}), \quad (4.48)$$

oraz dla modów o $\mathbf{k} \neq 0$:

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{k} \neq 0, t) &= \hat{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{-i\mu t} \\ &= f_{\mathbf{k}}(\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mu+\omega_1)t} + \gamma_1 \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mu-\omega_1)t}) + \\ &+ g_{\mathbf{k}}(\hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mu-\omega_2)t} + \gamma_2 \hat{\beta}_{\mathbf{k}} e^{-i(\mu+\omega_2)t}),\end{aligned}\quad (4.49)$$

gdzie:

$$|f_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{z_{\mathbf{k}}}{1 - |\gamma_1(\mathbf{k})|^2}, \quad (4.50)$$

$$|g_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{z_{\mathbf{k}}}{1 - |\gamma_2(\mathbf{k})|^2}. \quad (4.51)$$

Warto zauważyć, że znamy $f_{\mathbf{k}}$ i $g_{\mathbf{k}}$ z dokładnością do fazy. Dlatego w przyszłych rachunkach, o ile to będzie konieczne, możemy przyjąć, że funkcje $f_{\mathbf{k}}$ i $g_{\mathbf{k}}$ są rzeczywiste.

Zwróćmy uwagę, że postać pola (4.49) ma formę transformacji Bogoliubowa (1.15). Ponieważ pole relatywistyczne opisuje dwa rodzaje wzbudzeń, to w (4.49) mamy dwa elementy transformacji. Współczynniki $f_{\mathbf{k}}$ oraz $f_{\mathbf{k}}\gamma_1$ pierwszego elementu są relatywistycznym odpowiednikiem współczynników $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$ znanej transformacji Bogoliubowa.

4.2.3 Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \int_{\mathbf{r}} \left((2m)^2 \hat{\Pi} \hat{\Pi}^\dagger + \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi}^\dagger \nabla_{\mathbf{r}} \hat{\Psi} + m^2 \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} + \frac{\lambda}{2} \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} \hat{\Psi} \right) d^3 \mathbf{r} \quad (4.52)$$

Konsekwentnie ze zlinearyzowanymi równaniami ruchu rozwijamy hamiltonian zachowując wyrazy kwadratowe w $\hat{A}_{\mathbf{k}}$, oraz wyrazy niższego rzędu. Taki hamiltonian nie zachowuje ładunku, więc w celu kontrolowania jego średniej wartości rozważamy funkcjonał:

$$\hat{F} = \hat{H} - \mu \hat{Q}, \quad (4.53)$$

gdzie wprowadziliśmy mnożnik Lagrange'a μ .

Funkcjonał \hat{F} wyrażony przez ϕ_0 oraz $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ ma postać:

$$\begin{aligned}2m\tilde{F} &= -\frac{\lambda}{2} |\phi_0|^4 - \mu + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \left(\hat{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{k}} + L_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{k}} + \frac{\lambda}{2} \phi_0^{*2} \hat{A}_{\mathbf{k}} \hat{A}_{-\mathbf{k}} + \frac{\lambda}{2} \phi_0^2 \hat{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right).\end{aligned}\quad (4.54)$$

Podczas rachunków korzystaliśmy z reguł komutacyjnych $[\hat{A}_{\mathbf{k}}, \hat{A}_{\mathbf{k}}^\dagger] = 0$ i $[\hat{A}_{\mathbf{k}}, \hat{A}_{-\mathbf{k}}^\dagger] = i$, które wynikają z reguł komutacyjnych pola.

Używając przybliżonej formy $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ danej przez (4.49), wyrażamy \tilde{F} przez $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$. W ogólności możemy spodziewać się wyrazów takich jak: $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$, oraz $\hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ i różnego rodzaju wyrazów mieszanych typu $\hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$. Dokładne rachunki pokazują jednak, że wyrazy mieszane nie występują, a funkcjonał \tilde{F} ma postać:

$$\tilde{F} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\omega_1(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \omega_2(\mathbf{k}) \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \right) - \frac{\lambda}{2} |\phi_0|^4 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_1(\mathbf{k}) + \omega_2(\mathbf{k})) . \quad (4.55)$$

Zauważmy, że otrzymanie diagonalnej postaci hamiltonianu jest możliwe wtedy, gdy mnożnik Lagrange'a (potencjał chemiczny) jest co do wartości równy częstości μ we wzorze (4.22). Ostatni wyraz zdiagonalizowanego funkcjonału \tilde{F} jest nieskończony, lecz stały. Przesuwając skalę energii o dwa ostatnie wyrazy w (4.55), otrzymujemy zdiagonalizowany funkcjonał w następującej postaci:

$$\tilde{F} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\omega_1(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \omega_2(\mathbf{k}) \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \right) . \quad (4.56)$$

Hamiltonian ten opisuje dwa rodzaje niezależnych wzbudzeń cząstek. Ze względu na reguły komutacyjne $[\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1$ i $[\beta_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}}^\dagger] = 1$ są to bozony. Cząstki pierwszego typu charakteryzowane są przez fononową relację dyspersyjną ω_1 , liniową dla małych $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$. Cząstki drugiego typu mają relację dyspersyjną ω_2 kwadratową dla małych pędów, co jest typowe dla masywnych cząstek.

4.2.4 Ładunek

$$\hat{Q} = \frac{i}{2m} \int_{\mathbf{r}} \left(\hat{\Psi}^\dagger \hat{\Psi} - \hat{\Psi} \hat{\Psi}^\dagger \right) d^3 \mathbf{r} \quad (4.57)$$

Zgodnie z wynikami poprzednich podrozdziałów, ładunek można wyrazić przez ϕ_0 , $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ oraz $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$. Po pominięciu wyrazów gwałtownie oscylujących w czasie, ładunek przyjmuje postać:

$$\hat{Q} \cong \frac{\mu}{m} |\phi_0|^2 + q_A(0) \hat{\beta}_0^\dagger \hat{\beta}_0 + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left(q_P(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + q_A(\mathbf{k}) \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \right) + \mathcal{C} , \quad (4.58)$$

gdzie

$$q_P(\mathbf{k}) = \frac{2\mu}{\omega_1} \frac{L_{\mathbf{k}} + \omega_1^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2} , \quad (4.59)$$

$$q_A(\mathbf{k}) = -\frac{2\mu}{\omega_2} \frac{L_{\mathbf{k}} + \omega_2^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2} , \quad (4.60)$$

i

$$\mathcal{C} = \sum_k \left\{ |f_{\mathbf{k}}|^2 |\gamma_1|^2 \left(1 + \frac{\omega_1(\mathbf{k})}{\mu} \right) + |g_{\mathbf{k}}|^2 |\gamma_2|^2 \left(1 - \frac{\omega_2(\mathbf{k})}{\mu} \right) \right\}. \quad (4.61)$$

\mathcal{C} jest wynikiem niekomutowania operatorów $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger$ oraz $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ i $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger$, i jest małą liczbą w porównaniu z wartością ładunku. Widać, że ładunek pierwszego typu cząstek jest większy od zera $q_P(\mathbf{k}) > 0$, podczas gdy ładunek drugiego typu cząstek jest mniejszy od zera $q_A(\mathbf{k}) < 0$. Dodatkowo, w granicy dużych k mamy: $q_P \rightarrow 1$, $q_A \rightarrow -1$. W ogólności jednak, oba ładunki mogą zależeć od \mathbf{k} , co będziemy szczegółowo analizować w podrozdziale 4.4.

Zwróćmy uwagę, że jeśli we wzorze (4.58) na ładunek \hat{Q} wyraz z $|\phi_0|^2$ jest dominujący, to pozostałe wyrazy możemy pominąć. Zdefiniujmy część ładunku zależną tylko od $|\phi_0|^2$ jako:

$$Q^{(0)} = \frac{\mu}{m} |\phi_0|^2. \quad (4.62)$$

Wtedy równanie (4.62) na $Q^{(0)}$, oraz równanie (4.23) na μ jednoznacznie wyznaczają wartość potencjału chemicznego μ oraz $|\phi_0|^2$.

4.2.5 Granica pola nieoddziałującego: $\lambda \rightarrow 0$

W granicy nieoddziałującego pola poszczególne funkcje mają postać: $L_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2$, $\mu = m$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$ i $f_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}} = \sqrt{m/\omega_{\mathbf{k}}}$, gdzie $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2}$ jest energią cząstek nieoddziałujących. Wówczas, dodatnio naładowane pole $\hat{\Psi}$ wynosi:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{m}{\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t} + \hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger e^{i\omega_{\mathbf{k}}t} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (4.63)$$

jest to dokładnie postać pola nieoddziałującego (4.14), gdzie wzbudzenia o dodatniej energii zwane są cząstkami, a wzbudzenia o ujemnej energii - antycząstkami. Zgodnie z tą nomenklaturą $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem anihilacji cząstki, a $\hat{\beta}_{-\mathbf{k}}^\dagger$ jest operatorem kreacji antycząstki.

Łatwo sprawdzić, że zarówno ładunek (4.58), jak i hamiltonian (4.56) przyjmują poprawną granicę pola nieoddziałującego.

Granica pola nieoddziałującego wyznacza dobrą interpretację naszego oddziałującego modelu. $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem anihilacji cząstki o energii $\omega_1(\mathbf{k})$ i pędzie \mathbf{k} , podczas gdy $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ jest operatorem anihilacji antycząstki o energii $\omega_2(\mathbf{k})$ i pędzie \mathbf{k} . Stąd też, uzasadniona jest następująca definicja operatora liczby cząstek i antycząstek w modzie \mathbf{k} :

$$\hat{N}_{\mathbf{k}}^P = \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \quad (4.64)$$

$$\hat{N}_{\mathbf{k}}^A = \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}, \quad (4.65)$$

gdzie P oznacza cząstki, natomiast A - antycząstki.

4.2.6 Granica nierelatywistyczna

Granice nierelatywistyczną wyznaczamy dla nieliniowego równania Kleina-Gordona (4.21), oraz przybliżonego rozwiązania (4.22) z $A_{\mathbf{k}}$ równym (4.49). W tym celu stosujemy rozumowanie H. Feshbach'a i F. Villars'a [53], które zostało również użyte w [50, 51]. W granicy nierelatywistycznej oczekujemy, że: (i) masa spoczynkowa jest dominująca, w szczególności jest znacznie większa od energii kinetycznej, oraz (ii) zakładamy, że cząstki mają dodatnią energię.

Rozważamy następujący ansatz dla pola, które spełnia NLKGE:

$$\hat{\Psi} = \hat{\psi} + \hat{\chi}, \quad \text{oraz} \quad i\dot{\hat{\Psi}} = m(\hat{\psi} - \hat{\chi}). \quad (4.66)$$

Pole $\hat{\Psi}$, oraz sprzężony pęd $\dot{\hat{\Psi}}$ wyrażamy poprzez $\hat{\psi}$ i $\hat{\chi}$. Dwa równania różniczkowe na $\hat{\psi}$ i $\hat{\chi}$ mają postać:

$$i\dot{\hat{\psi}} = -\frac{1}{2m}\Delta(\hat{\psi} + \hat{\chi}) + m\hat{\psi} + \frac{\lambda}{2m}(\hat{\psi}^\dagger + \hat{\chi}^\dagger)(\hat{\psi} + \hat{\chi})(\hat{\psi} + \hat{\chi}), \quad (4.67)$$

$$i\dot{\hat{\chi}} = \frac{1}{2m}\Delta(\hat{\psi} + \hat{\chi}) - m\hat{\chi} - \frac{\lambda}{2m}(\hat{\psi}^\dagger + \hat{\chi}^\dagger)(\hat{\psi} + \hat{\chi})(\hat{\psi} + \hat{\chi}), \quad (4.68)$$

i są równoważne nieliniowemu równaniu Kleina - Gordona.

Dodanie stronami równań (4.67) i (4.68) prowadzi do tożsamości, natomiast różnica spełnia:

$$i(\dot{\hat{\psi}} - \dot{\hat{\chi}}) = -\frac{1}{m}\Delta(\hat{\psi} + \hat{\chi}) + m(\hat{\psi} + \hat{\chi}) + \frac{\lambda}{m}(\hat{\psi}^\dagger + \hat{\chi}^\dagger)(\hat{\psi} + \hat{\chi})(\hat{\psi} + \hat{\chi}). \quad (4.69)$$

Uwzględniając początkowy ansatz (4.66) widzimy, że jest to nieliniowe równanie Kleina-Gordona. Dodatkowo, ładunek (4.13) wyrażony poprzez $\hat{\psi}$ i $\hat{\chi}$ wynosi:

$$\hat{Q} = \sum_{\mathbf{r}} (\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} - \hat{\chi}^\dagger \hat{\chi}) dV. \quad (4.70)$$

W granicy nierelatywistycznej, czyli małych prędkości oraz dodatnich energii cząstek, można pokazać, że $\hat{\chi} \rightarrow \Delta\hat{\psi}/m^2$. Uzasadnia to pominięcie $\hat{\chi}$ w stosunku do $\hat{\psi}$ w równaniu (4.67). Eliminując wyraz z masą poprzez $\hat{\psi} = \hat{\psi}_{nr} \exp(-imt)$ otrzymujemy równanie Grossa-Pitajewskiego:

$$i\dot{\hat{\psi}}_{nr} = -\frac{1}{2m}\Delta\hat{\psi}_{nr} + \frac{\lambda}{2m}\hat{\psi}_{nr}^\dagger \hat{\psi}_{nr} \hat{\psi}_{nr}, \quad (4.71)$$

gdzie $\lambda/2m$ jest odpowiednikiem nierelatywistycznej stałej sprzężenia g . Ładunek natomiast przyjmuje postać:

$$\hat{Q} \rightarrow \int_{\mathbf{r}} \hat{\psi}_{nr}^\dagger \hat{\psi}_{nr} d^3\mathbf{r} = \hat{N} \quad (4.72)$$

i jest odpowiednikiem operatora liczby cząstek w układzie.

Ze względu na założoną dodatnią energię cząstek, rozważmy granicę nierelatywistyczną poszczególnych elementów fragmentu pola: $f_{\mathbf{k}}(\hat{a}_{\mathbf{k}} + \gamma_1 \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger)$, który opisuje cząstki. Spodziewamy się, że w granicy nierelatywistycznej ω_1 ma postać energii wzbudzeń Bogoliubowa, natomiast współczynniki $f_{\mathbf{k}}$, oraz $f_{\mathbf{k}}\gamma_1$ sprowadzają się do współczynników transformacji Bogoliubowa $u_{\mathbf{k}}$ i $v_{\mathbf{k}}$.

Widmo wzbudzeń. W $\omega_1(\mathbf{k})^2$ zadany wzorem (4.29) rozwijamy pierwiastek w szereg Taylora i pomijając $1/m^2$ w porównaniu ze stałą liczbą, otrzymujemy:

$$\omega_{1nr}^2(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \left(\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + 2\frac{\lambda}{2m}|\phi_0|^2 \right), \quad (4.73)$$

co jest dokładnie energią wzbudzeń Bogoliubowa (1.20) w przypadku nierelatywistycznym, jeśli $n_0 = |\phi_0|^2$ oraz $g = \lambda/2m$.

Współczynniki. Następująca kombinacja współczynników $f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}}\gamma_1$ i $f_{\mathbf{k}}^2 - f_{\mathbf{k}}^2|\gamma_1|^2$ mają nierelatywistyczny odpowiednik: $f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}}\gamma_1 \rightarrow u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = n_0g/2\varepsilon_{\mathbf{k}}$, oraz $f_{\mathbf{k}}^2 - f_{\mathbf{k}}^2|\gamma_1|^2 \rightarrow u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$. Żeby to sprawdzić, zbadamy granicę nierelatywistyczną tych kombinacji. Wykonując rachunki dokładnie w ten sam sposób jak w przypadku widma wzbudzeń, otrzymujemy: $(f_{\mathbf{k}}^2 - f_{\mathbf{k}}^2|\gamma_1|^2)_{nr} \rightarrow 1$, oraz $(f_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}}\gamma_1)_{nr} \rightarrow \lambda|\phi_0|^2/4m\omega_{1nr}$. Uwzględniając, że $n_0 = |\phi_0|^2$ oraz $g = \lambda/2m$, współczynniki przyjmują spodziewaną granicę nierelatywistyczną.

Potencjał chemiczny. Z dokładnością do drugiego rzędu rozwinięcia w szereg Taylora potencjał chemiczny wynosi $\mu_{nr} = m + \lambda|\phi_0|^2/2m$. Eliminacja dużych częstości poprzez przejście do pola $\hat{\Psi}_{nr} = \hat{\Psi} \exp(imt)$ wyznacza jego granicę nierelatywistyczną: $\mu_{nr} = \lambda|\phi_0|^2/2m$.

Podsumowując, $\lambda/2m$ jest odpowiednikiem nierelatywistycznej stałej sprężenia g , natomiast $|\phi_0|^2$ jest odpowiednikiem liczby cząstek w kondensacie. Po eliminacji wyrazu z masą, poprzez $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}_{nr} \exp(-imt)$, w granicy nierelatywistycznej równanie Kleina–Gordona przyjmuje postać równania Grossa–Pitajewskiego, podczas gdy część relatywistycznego pola, opisująca cząstki, przyjmuje postać transformacji Bogoliubowa.

Łatwo jest sprawdzić, że w granicy pola nierelatywistycznego ładunek (4.58) jest równy operatorowi całkowitej liczby cząstek, a hamiltonian (4.56) przyjmuje taką samą postać jak w przypadku nierelatywistycznym.

4.3 Metoda pól klasycznych: opis w temperaturze większej od zera

W tym podrozdziale pokażemy w jaki sposób zastosować metodę pól klasycznych do opisu termicznych własności relatywistycznego pola bozonowego. Zgodnie z ideą metody pól klasycznych, zastępujemy wszystkie operatory przez

zespolone funkcje, następnie generujemy stan początkowy o zadanej energii oraz ładunku i śledzimy dynamikę pola.

Operator pola oraz pędy kanonicznie sprzężone zastępujemy przez zespolone amplitudy:

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.74)$$

$$\hat{\Pi}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Pi(\mathbf{r}, t). \quad (4.75)$$

Funkcja Ψ opisująca relatywistyczne pole bozonowe spełnia nieliniowe równanie Kleina–Gordona, które ma dwie stałe ruchu: energię oraz ładunek.

Warto zwrócić uwagę, że podobnie jak równanie Grossa-Pitajewskiego, nieliniowe równanie Kleina-Gordona jest niezmiennicze względem skalowania: $\Psi \rightarrow \Psi\sqrt{Q}$, $\Pi \rightarrow \Pi\sqrt{Q}$ oraz $\lambda \rightarrow Q\lambda$. Takie skalowanie prowadzi do równania:

$$\ddot{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Delta_{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}, t) - m^2\Psi(\mathbf{r}, t) - \lambda Q|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (4.76)$$

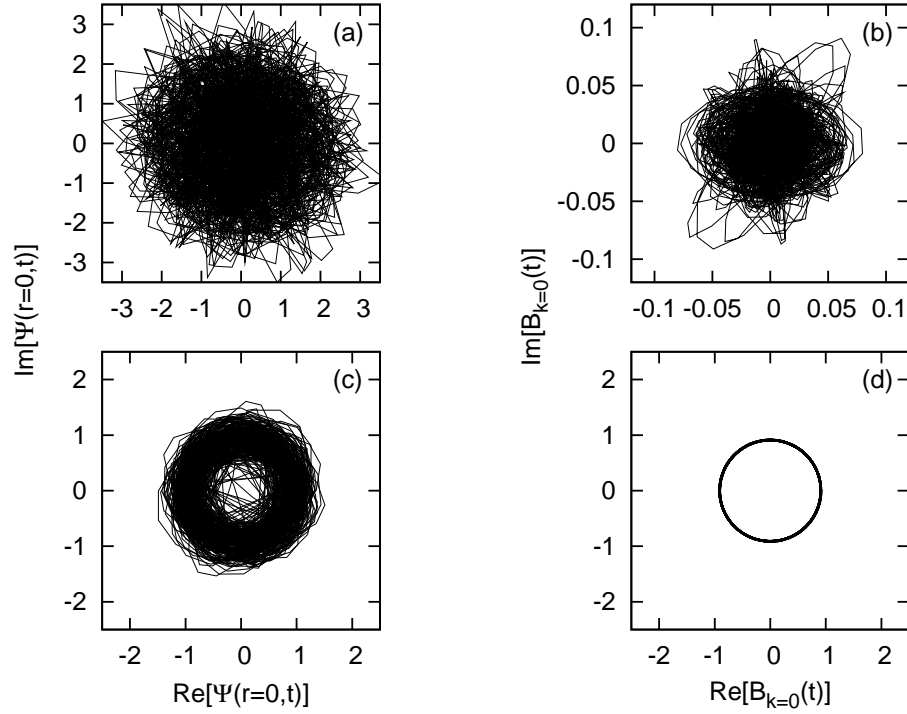
gdzie pole Ψ posiada ładunek unormowany do jedności. W równaniu ruchu (4.76) występuje wolny parametr λQ , a poszczególne wielkości obliczane numerycznie są skalowane przez Q . Wartości λ oraz Q można wyznaczyć oddzielnie np. z warunku makroskopowego obsadzenia klasycznych modów, lub z żądania dopasowania klasycznego rozkładu energii do kwantowego rozkładu (problem ten był szeroko dyskutowany w rozdziale 1).

Nieliniowe równanie Kleina–Gordona (4.76) rozwiązujemy numerycznie. Stan początkowy pola Ψ i pędów kanonicznie sprzężonych Π generujemy losowo w przestrzeni pędów dla danej całkowitej energii $E = \langle H \rangle$, oraz ładunku $Q = \langle Q \rangle = 1$. Numeryczne rachunki pokazują, że pole poddane wstępnej ewolucji osiąga stan równowagi. W przyszłej analizie pokażemy, że jest to stan termiczny scharakteryzowany temperaturą. Sprawdziliśmy, że końcowy stan równowagi zależy tylko od wartości energii i ładunku, nie zaś od wyboru stanu początkowego. Natomiast, czas osiągnięcia stanu stacjonarnego istotnie zależy od wybranego stanu początkowego i siły nieliniowości. Wartości poszczególnych parametrów używanych w symulacjach numerycznych wynoszą: $L_x = L_y = L_z = 1$, $m = 60$, $\lambda Q = 900$, oraz liczba punktów na sieci od 10^3 do 40^3 .

W pierwszym kroku badaliśmy pole w przestrzeni pędów:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_{min}}^{\mathbf{k}_{max}} B_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.77)$$

gdzie $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ jest bezwymiarowym wektorem falowym ograniczonym do pierwszej strefy Brillouin'a, $k_j \in [-\pi/L_j, \pi/L_j]$, a j oznacza kierunek.



Rysunek 4.1: Część urojona od części rzeczywistej pola w funkcji czasu. Rejon wysokiej energii ($E = 460$): (a) w przestrzeni położeń dla $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$ i (b) w przestrzeni pędów dla $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$. Rejon niskich energii ($E = 75$): (c) w przestrzeni rzeczywistej – $\Psi(0, t)$, oraz (d) w przestrzeni pędów – $B_0(t)$. Parametry wynoszą: $m = 60$, $\lambda Q = 900$ i liczba punktów na sieci 16^3 .

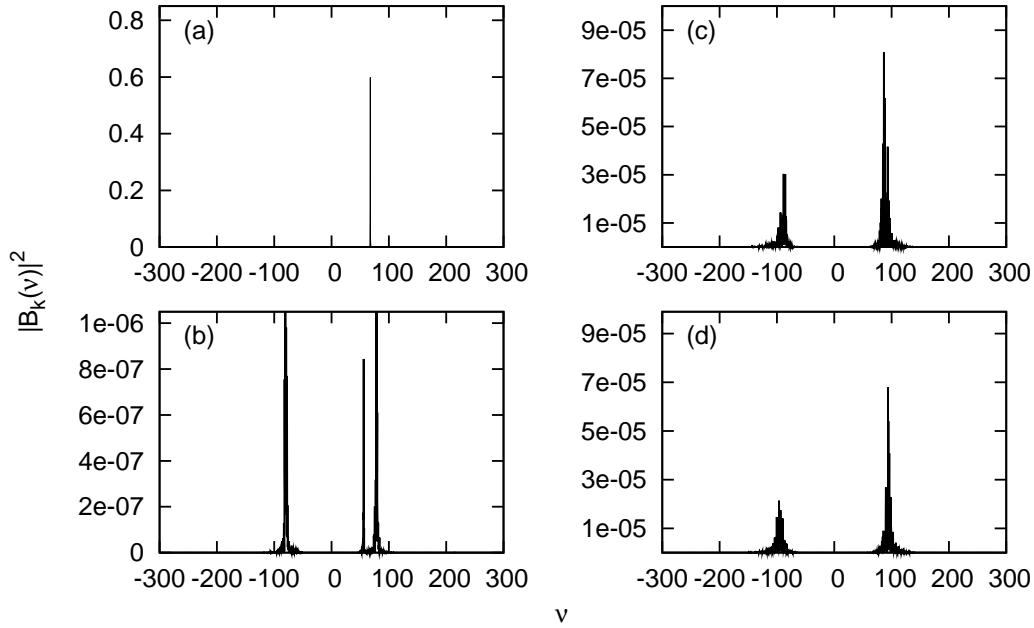
Rachunki numeryczne pokazały, że istnieją dwa jakościowo różne rejony o niskiej (rzędu m), oraz wysokiej (większej od m) energii.

Pole Ψ można przedstawić na płaszczyźnie zespolonej. Na rysunku 4.1 przedstawiona została ewolucja takiego wektora: (a), (c) w przestrzeni położeń w punkcie $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$, oraz (b), (d) w przestrzeni pędów w punkcie $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$. W przypadku wysokich energii ($E = 460$) (a), (b) dynamika jest przypadkowa – linia wypełnia cały okrąg, natomiast dla niskich energii ($E = 75$) (c), (d) wektor pola porusza się po kole. Ten wynik sugeruje, że obszar niskich energii jest jakościowo różny od obszaru wysokich energii.

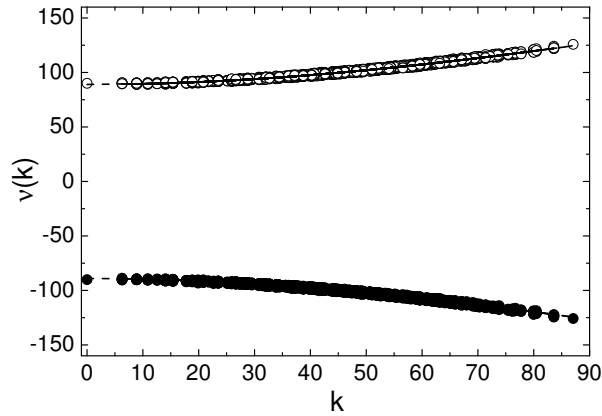
W drugim kroku badamy widmo amplitud. W tym celu wykonujemy transformatę Fouriera $B_{\mathbf{k}}(t)$ do przetrzeni częstotliwości ν :

$$B_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{\nu=\nu_{min}}^{\nu_{max}} B_{\mathbf{k}}(\nu)e^{-i\nu t}. \quad (4.78)$$

Na rysunku 4.2 pokazano moduł $|B_{\mathbf{k}}(\nu)|^2$ dla $\mathbf{k} = \pi(0, 0, 0)$, oraz $\mathbf{k} = \pi(3, 3, 3)$.



Rysunek 4.2: Widmo amplitud: niskie energie ($E = 75$) (a) dla $\mathbf{k} = \pi(0, 0, 0)$, oraz (b) dla $\mathbf{k} = \pi(3, 3, 3)$; wysokie energie ($E = 460$) (c) dla $\mathbf{k} = \pi(0, 0, 0)$, oraz (d) dla $\mathbf{k} = \pi(3, 3, 3)$. Parametry symulacji wynoszą: $m = 60$, $\lambda Q = 900$ i liczba punktów na sieci 16^3 .



Rysunek 4.3: Widmo energii: pozycje pików w funkcji wektora falowego obliczonego zgodnie z (4.79). Punkty – to wyniki symulacji numerycznych, a linie odpowiadają krzywej $\nu_{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + m_{eff}^2}$ dopasowanej do danych numerycznych z $m_{eff} = 89$. Parametry symulacji są następujące: $E = 460$, $m = 60$, $\lambda Q = 900$, liczba punktów na sieci 16^3 .

W obszarze wysokich energii widmo amplitud jest symetryczne względem zera i ma dwa wyraźne piki, które są wycentrowane wokół $\nu_{\mathbf{k}}$ oraz $-\nu_{\mathbf{k}}$, (rysunek 4.2c i 4.2d). Wynik ten jest analogiczny jak w przypadku pola nieoddziałującego, gdzie również obserwuje się dwa piki w widmie amplitud.

Centralną częstość każdego maksimum obliczamy numerycznie według:

$$\nu_{\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\nu \in S} \nu |B_{\mathbf{k}}(\nu)|^2}{\sum_{\nu \in S} |B_{\mathbf{k}}(\nu)|^2}, \quad (4.79)$$

gdzie S oznacza obszar szerokości pików. Na rysunku 4.3 pokazano położenia pików w funkcji długości wektora falowego $k = |\mathbf{k}|$. Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych, a linie to rezultat dopasowania $\nu_k = \sqrt{k^2 + m_{eff}^2}$ do danych numerycznych z $m_{eff} = 89$.

Pomijając szerokości pików, możemy przybliżyć postać pola w obszarze wysokich energii przez:

$$B_{\mathbf{k}}(t) \cong \kappa_{\mathbf{k}}^P e^{-i\nu_{\mathbf{k}}t} + \kappa_{\mathbf{k}}^L e^{i\nu_{\mathbf{k}}t}, \quad (4.80)$$

gdzie $|\kappa_{\mathbf{k}}^P|^2$ jest amplitudą pików prawego, a $|\kappa_{\mathbf{k}}^L|^2$ jest amplitudą pików lewego. Przybliżenie to pokazuje, że dynamika pola w obszarze wysokich energii jest analogiczna do dynamiki pola nieoddziałującego (4.14). W obszarze energii dużo większych od m nieliniowa dynamika wpływa tylko na masę elementarnych wzbudzeń, zwiększając jej wartość do m_{eff} .

W obszarze niskich energii widmo amplitud jest szczególnie ciekawe (rysunek 4.2a i 4.2b), wraz z obniżaniem energii, amplituda pików modu o zerowym pędzie staje się dominująca. Na rysunku 4.2a w skali liniowej widoczne jest jedno dodatnio położone maksimum, którego amplituda dominuje nad innymi. Dla modu o pędzie $\mathbf{k} = \pi(3, 3, 3)$ (rysunek 4.2b), po stronie ujemnych częstości obserwujemy jeden pik, tak jak w przypadku wysokich energii, natomiast po stronie częstości dodatnich – dwa piki. Przypominamy, że widmo amplitud w przybliżeniu Bogolibowa dla $k = 0$ ma trzy piki (4.48), podczas gdy dla $k \neq 0$ składa się z czterech pików (4.49). Ponieważ w skali liniowej nie widać wszystkich pików, dopiero zastosowanie skali logarytmicznej ujawnia złożoność widma taką, jak w przybliżeniu Bogoliubowa.

Na rysunku 4.4 pokazujemy widmo amplitud w skali logarytmicznej dla modów: $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$, $\mathbf{k} = \pi(0, 0, 1)$, $\mathbf{k} = \pi(3, 3, 3)$ oraz $\mathbf{k} = \pi(5, 5, 5)$. W modzie o $k = 0$ obserwujemy trzy piki. Zgodnie z nomenklaturą wprowadzoną w procedurze Bogoliubowa, pozycję najwyższego piku (czerwona linia) nazywamy potencjałem chemicznym μ , a amplitudę tego piku oznaczamy przez $|\phi_0|^2$. Częstości pozostałych dwóch pików, symetrycznych względem μ , oznaczamy: $\nu_2^+(0) = \mu + \nu_2(0)$ (linia niebieska prawa) oraz $\nu_2^-(0) = \mu - \nu_2(0)$ (linia niebieska lewa), przy czym obserwujemy, że $\nu_1^+(0)$ jest dodatnie, a $\nu_2^-(0)$ jest ujemne.

Widma amplitud dla pozostałych modów posiadają cztery wyraźne piki, których pozycje są symetryczne względem μ . Rachunki numeryczne pokazują, że jeśli zaniedbamy szerokości pików, to widmo wzbudzeń będzie miało dwie gałęzie. Pierwszą z nich, na rysunku 4.4 zaznaczoną kolorem czerwonym, oznaczamy jako:

$$\nu_1^\pm(\mathbf{k}) = \mu \pm \nu_1(\mathbf{k}), \quad (4.81)$$

podczas gdy drugą, zaznaczoną kolorem niebieskim, oznaczamy przez:

$$\nu_2^\pm(\mathbf{k}) = \mu \pm \nu_2(\mathbf{k}). \quad (4.82)$$

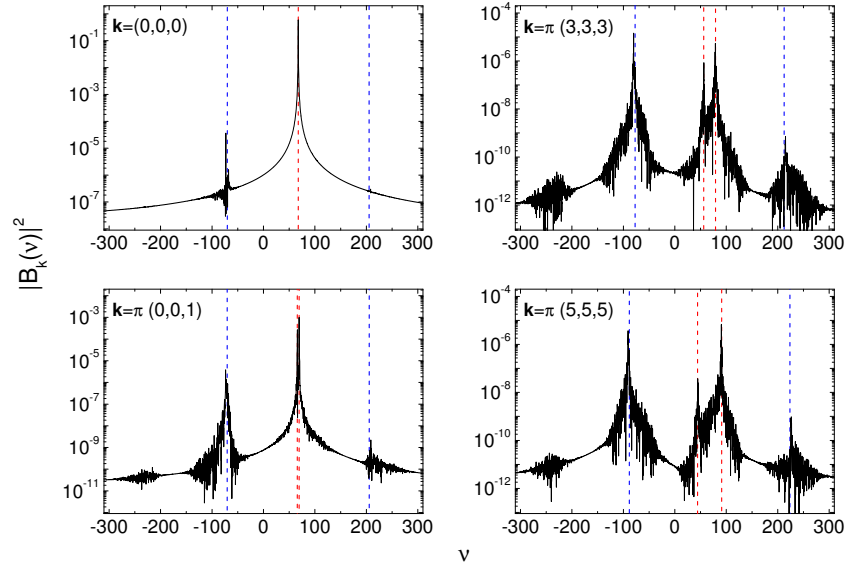
Przy czym znak "+" dotyczy piku prawego względem μ , a znak "-" piku lewego. Warto zauważyć, że dla pierwszej gałęzi obie częstości ν_1^\pm są dodatnie, a dla drugiej gałęzi ν_2^- jest ujemne. Pik odpowiadający dodatniej częstości ν_2^+ ma praktycznie zerową wysokość. Na rysunku 4.5 naniesiono pozycje wszystkich pików, które zostały obliczone zgodnie z (4.79). Punkty oznaczają wyniki symulacji numerycznych, natomiast linie – przewidywania procedury Bogoliubowa z wartościami potencjału chemicznego μ , oraz $|\phi_0|^2$ wziętych z rachunków numerycznych (przybliżenie Bogoliubowa z uwzględnioną zmianą μ i $|\phi_0|^2$ nazywać będziemy przybliżeniem Bogoliubowa–Popowa). Numeryczne symulacje pokazują, że $\nu_1(\mathbf{k})$ ma liniową relację dyspersyjną dla małych \mathbf{k} , natomiast $\nu_2(\mathbf{k})$ ma w tym obszarze kwadratową relację dyspersyjną.

Stan stacjonarny pola w przestrzeni pędów może być w przybliżeniu (zaniedbanie szerokości pików) przedstawiony w postaci:

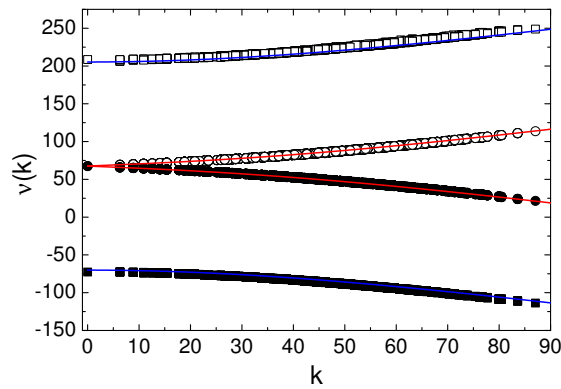
$$\begin{aligned} B_{\mathbf{k}}(t) &= \mathcal{A}_1^+(\mathbf{k})e^{-i(\mu+\nu_1)t} + \mathcal{A}_1^-(\mathbf{k})e^{-i(\mu-\nu_1)t} \\ &+ \mathcal{A}_2^+(\mathbf{k})e^{-i(\mu+\nu_2)t} + \mathcal{A}_2^-(\mathbf{k})e^{-i(\mu-\nu_2)t}, \end{aligned} \quad (4.83)$$

gdzie $|\mathcal{A}_{1,2}^\pm(\mathbf{k})|^2$ jest równe uśrednionej amplitudzie piku o pozycji $\nu_{1,2}^\pm(\mathbf{k})$. Amplitudę piku obliczamy numerycznie według:

$$|\mathcal{A}_{1,2}^\pm(\mathbf{k})|^2 = \sum_{\nu \in S} |B_{\mathbf{k}}(\nu_{1,2}^\pm(\mathbf{k}))|^2, \quad (4.84)$$



Rysunek 4.4: Widmo amplitud w rejonie niskich energii. Linie ciągłe oznaczają wyniki symulacji numerycznych, linie przerywane – pozycje pików danych przez procedurę linearyzacji z μ , oraz $|\phi_0|^2$ wziętych z rachunków numerycznych. W modzie z $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ położenie pików o maksymalnej amplitudzie (linia czerwona) nazywamy μ , natomiast jego amplitudę $|\phi_0|^2$, lewy pik względem μ oznaczamy przez $\nu_2^-(0)$ (lewa niebieska linia), a prawy – $\nu_2^+(0)$ (prawa niebieska linia). Oznaczenia dla pozostałych modów są następujące: lewy $\nu_1^-(\mathbf{k})$ i prawy $\nu_1^+(\mathbf{k})$ pik zaznaczone są czerwoną przerywaną linią, natomiast lewy $\nu_2^-(\mathbf{k})$ i prawy $\nu_2^+(\mathbf{k})$ pik – przerywaną linią niebieską. Parametry wynoszą: masa $m = 60$, nieliniowość $\lambda Q = 900$, energia $E = 75$, oraz liczba punktów na sieci 16^3 .



Rysunek 4.5: Widmo energii: pozycje pików w funkcji wektora falowego obliczonego zgodnie z (4.79). Punkty odpowiadają wynikom numerycznym, (i) puste koła to $\nu_1^+(\mathbf{k})$, (ii) pełne koła $\nu_1^-(\mathbf{k})$, (iii) puste sześciiany $\nu_2^+(\mathbf{k})$ i (iv) wypełnione sześciiany $\nu_2^-(\mathbf{k})$. Linie dane są przez przybliżenie Bogoliubowa (4.29), (4.30) z potencjałem chemicznym μ i ϕ_0 wziętych z rachunków numerycznych. Parametry to: $m = 60$, $\lambda Q = 900$, $E = 75$ i liczba punktów na sieci 16^3 .

gdzie sumowanie rozciąga się po szerokości pików S ³. Widzimy, że postać pola (4.83) jest formalnie identyczna do postaci pola w $T = 0$, otrzymanej w przybliżeniu Bogoliubowa. O ile w przybliżeniu Bogoliubowa w hamiltonianie zachowaliśmy jedynie wyrazy kwadratowe w $A_{\mathbf{k}}$ (4.54), to w metodzie pól klasycznych uwzględniamy pełną postać oddziaływania.

Analiza dynamiki pola rozważanej w przybliżeniu Bogoliubowa⁴ pokazała, że pole ma złożoną strukturę, a jego klasyczna wersja w przestrzeni pędów dla $k \neq 0$ ma postać (4.49):

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{k}, t) = & f_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}} e^{-i(\omega_1 + \mu)t} + \gamma_1 \alpha_{-\mathbf{k}}^* e^{-i(\mu - \omega_1)t}) + \\ & + g_{\mathbf{k}} (\beta_{-\mathbf{k}}^* e^{-i(\mu - \omega_2)t} + \gamma_2 \beta_{\mathbf{k}} e^{-i(\omega_2 + \mu)t}) . \end{aligned} \quad (4.85)$$

Porównując wzory (4.83) i (4.85) widzimy, że pozycje poszczególnych pików obliczonych numerycznie odpowiadają wynikom procedury Bogoliubowa:

$$\nu_1^+(\mathbf{k}) \rightarrow \mu + \omega_1(\mathbf{k}), \quad (4.86)$$

$$\nu_1^-(\mathbf{k}) \rightarrow \mu - \omega_1(\mathbf{k}), \quad (4.87)$$

$$\nu_2^-(\mathbf{k}) \rightarrow \mu - \omega_2(\mathbf{k}), \quad (4.88)$$

$$\nu_2^+(\mathbf{k}) \rightarrow \mu + \omega_2(\mathbf{k}), \quad (4.89)$$

podobnie jest dla amplitud pików:

$$\mathcal{A}_1^+(\mathbf{k}) \rightarrow f_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}, \quad (4.90)$$

$$\mathcal{A}_1^-(\mathbf{k}) \rightarrow f_{\mathbf{k}} \gamma_1 \alpha_{-\mathbf{k}}^*, \quad (4.91)$$

$$\mathcal{A}_2^-(\mathbf{k}) \rightarrow g_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}^*, \quad (4.92)$$

$$\mathcal{A}_2^+(\mathbf{k}) \rightarrow g_{\mathbf{k}} \gamma_2 \beta_{\mathbf{k}}. \quad (4.93)$$

Należy jednak podkreślić, że w metodzie pól klasycznych potencjał chemiczny μ oraz $|\phi_0|^2$ są funkcjami temperatury⁵.

Przykład 5 *Zwróćmy uwagę na parametry symulacji numerycznych, t.j. $E = 75$, $\lambda Q = 900$ i $m = 60$. Przybliżenie Bogoliubowa, z założeniem $Q^{(0)} = Q$, wyznacza wartość potencjału chemicznego $\mu = 66.43$ oraz $|\phi_0|^2 = 0.9$, podczas gdy wartości obliczone w eksperymencie numerycznym są trochę inne: $\mu = 67.59$ i $|\phi_0|^2 = 0.85$. Przypominamy, że przybliżenie Bogoliubowa jest słuszne jedynie w $T = 0$, co odpowiada energii $E \sim 65$, podczas gdy w symulacjach numerycznych energia wynosi $E = 75$.*

³Odcinek S jest dokładnie taki sam jak w (4.79).

⁴patrz podrozdział 4.2

⁵W następnym podrozdziale zajmiemy się szczegółową analizą temperaturowej zależności potencjału chemicznego μ oraz $|\phi_0|^2$.

Analizując wyniki symulacji numerycznych możemy posłużyć się wyprowadzonymi w przybliżeniu Bogoliubowa związkami. Na podstawie wnioskujemy, że pierwszy rodzaj wzbudzeń $\nu_1(\mathbf{k})$, o liniowej relacji dyspersyjnej dla niskich k , to cząstki, natomiast drugi rodzaj wzbudzeń $\nu_2(\mathbf{k})$, o kwadratowej relacji dyspersyjnej dla małych k , to antycząstki.

Podsumowując, nieliniowość w równaniu ruchu wpływa na dynamikę pola. W obszarze wysokich energii oddziaływanie zmienia wartość masy na m_{eff} , co jest znanym i rozumianym zjawiskiem. Wartość m_{eff} można oszacować na podstawie przedstawionych tu rachunków numerycznych. W przypadku obszaru o niskich energiach sytuacja jest szczególnie ciekawa. Amplituda pików o pozycji μ w modzie o zerowej energii jest dominująca, co czyni ten mod wyróżnionym. Podobna sytuacja zachodzi w przypadku pola nierelatywistycznego, gdzie wyróżnienie modu jest objawem kondensacji w układzie. Dodatkowo, liniowa dla małych pędów relacja dyspersyjna wzbudzeń $\nu_1(\mathbf{k})$, świadczy o kondensacji cząstek w rozważanym układzie.

Analiza pola w obecności kondensatu jest domeną metody pól klasycznych, dlatego koncentrujemy się na badaniu termicznych własności relatywistycznego pola w obszarze niskich energii.

W metodzie pól klasycznych wyznaczenie temperatury bazuje na relacji ekwipartycji – równomiernego rozkładu energii cząstek w dostępnych modach. Energia cząstek w danym modzie jest równa iloczynowi liczby cząstek obsadzających ten mod i energii wzbudzenia pojedynczej cząstki.

Liczbę cząstek $N_{\mathbf{k}}^P = \alpha_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}}$ i antycząstek $N_{\mathbf{k}}^A = \beta_{\mathbf{k}}^* \beta_{\mathbf{k}}$ w modzie \mathbf{k} możemy zdefiniować korzystając z wyników przybliżenia Bogoliubowa dla pól klasycznych. Względę liczbę cząstek $n_{\mathbf{k}}^P$ obliczamy numerycznie zgodnie z:

$$n_{\mathbf{k}}^P \equiv \frac{N_{\mathbf{k}}^P}{Q} = \frac{|\mathcal{A}_1^+(\mathbf{k})|^2}{|f_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (4.94)$$

Analogicznie obliczamy względne obsadzenie modu przez antycząstki:

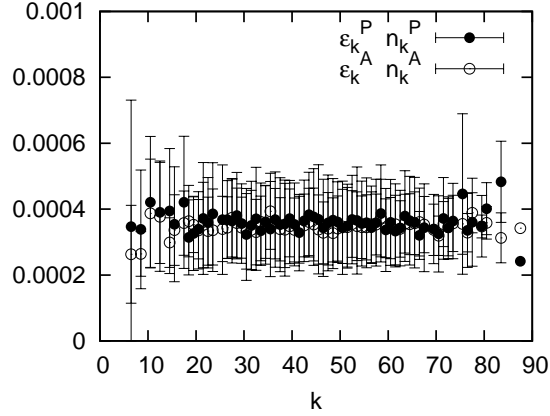
$$n_{\mathbf{k}}^A \equiv \frac{N_{\mathbf{k}}^A}{Q} = \frac{|\mathcal{A}_2^-(\mathbf{k})|^2}{|g_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (4.95)$$

Energie wzbudzenia cząstki $\varepsilon_{\mathbf{k}}^P$, oraz antycząstki $\varepsilon_{\mathbf{k}}^A$ w modzie o pędzie \mathbf{k} wynoszą:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^P = |\nu_1^+(\mathbf{k}) - \mu|, \quad (4.96)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^A = |\nu_2^-(\mathbf{k}) + \mu|. \quad (4.97)$$

Obydwie energie wzbudzenia, zarówno $\varepsilon_{\mathbf{k}}^P$ jak i $\varepsilon_{\mathbf{k}}^A$, liczymy względem zera, dlatego w równaniach pojawia się $\pm\mu$.



Rysunek 4.6: Relacja ekwipartycji dla cząstek (wypełnione koła) oraz antycząstek (puste koła) obliczona numerycznie. Linie błędów wyznaczają zakres fluktuacji wielkości dla danego wektora falowego k . Wartości parametrów wynoszą: $Q = 1.25 \times 10^5$, obliczona z (4.98) temperatura $T = 47.5$, $m = 60$, $\lambda Q = 900$, $E = 75$ i liczba modów 16^3 .

Na rysunku 4.6 przedstawiono energie cząstek (wypełnione koła) i antycząstek (puste koła) w funkcji $|\mathbf{k}|$, dodatkowo wyniki zostały uśrednione po kątach wektora falowego \mathbf{k} . Linie błędów oznaczają zakres fluktuacji energii o pędach $k = |\mathbf{k}|$ (w rachunkach numerycznych mamy wiele modów o zadanej długości k , stąd też rozrzut tych wartości). Zwróćmy uwagę, że relacja ekwipartycji cząstek, oraz antycząstek daje tę samą wartość energii.

Temperaturę definiujemy jako średnią wartość energii cząstek (antycząstek) przypadającą na jeden mod ⁶:

$$\tilde{T} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^P n_{\mathbf{k}}^P = \varepsilon_{\mathbf{k}}^A n_{\mathbf{k}}^A. \quad (4.98)$$

Ze względu na zastosowaną normalizację pola, wyznaczona numerycznie temperatura jest skalowana przez ładunek $\tilde{T} = T/Q$. Dla parametrów symulacji pokazanych na rysunku 4.6 skalowana temperatura wynosi ⁷: $\tilde{T} = 3.8 \times 10^{-4}$. W celu wyznaczenia nieskalowanej wartości temperatury należy skorzystać z założenia o makroskopowym obsadzeniu modów i najpierw wyznaczyć ładunek pola Q . W pierwszym rozdziale niniejszej rozprawy argumentowaliśmy, że prawidłowe dobranie obsadzenia modu o maksymalnej energii pozwala na wyznaczenie nieskalowanej temperatury. Pokazaliśmy, że obsadzenie to powinno być rzędu jedności. Wynik ten uogólniamy na przypadek relatywistycznego

⁶Temperaturę możemy zdefiniować tylko w sensie średnim, a jej wartość numeryczna jest obarczona błędem danym przez zakres fluktuacji.

⁷Jednostka temperatury to: $\hbar c/V^{1/3}k_B$, gdzie k_B jest stałą Boltzmana.

pola i żądamy, aby obsadzenie modu o najwyższej energii było równe jeden:

$$N_{\mathbf{k}_{max}}^P = 1, \quad (4.99)$$

$$N_{\mathbf{k}_{max}}^A = 1. \quad (4.100)$$

To założenie pozwala wyznaczyć wartość Q :

$$n_{\mathbf{k}_{max}} = \frac{N_{\mathbf{k}_{max}}}{Q} \Rightarrow Q = \frac{1}{n_{\mathbf{k}_{max}}}. \quad (4.101)$$

Obliczone numerycznie względne obsadzenie modu o maksymalnej energii jest średnio takie same, zarówno dla cząstek jak i antycząstek: $n_{\mathbf{k}_{max}}^P = n_{\mathbf{k}_{max}}^A \cong 8 \times 10^{-6}$. Zatem, 'prawdziwy' ładunek $Q = 1/n_{\mathbf{k}_{max}}^P = 1.25 \times 10^5$, nieskalowana temperatura wynosi $T = Q\tilde{T} = 47.5$ a nieliniowość jest równa $\lambda = (\lambda Q)/Q = 0.0072$.

Odpowiednio dobierając liczbę modów, tak żeby ładunek był stały, możemy obliczyć interesujące wielkości fizyczne w funkcji temperatury. W szczególności, w ostatnim podrozdziale zbadamy przejście do stanu kondensatu.

4.4 Przybliżenie Bogoliubowa–Popowa

Jak już zauważyliśmy w poprzednim podrozdziale, jeżeli pominiemy szerokości pików, to postać pola otrzymana w ramach metody pól klasycznych jest formalnie identyczna do postaci pola otrzymanej w przybliżeniu Bogoliubowa. Pokazaliśmy, że istnieje pewna odpowiedniość pomiędzy wielkościami obliczonymi numerycznie i analitycznie. W niniejszym podrozdziale pokażemy, że możemy zastosować formuły wyprowadzone w przybliżeniu Bogoliubowa w całym zakresie temperatur, pod warunkiem, że uwzględnimy wpływ temperatury na wartość potencjału chemicznego μ i amplitudy kondensatu ϕ_0 .

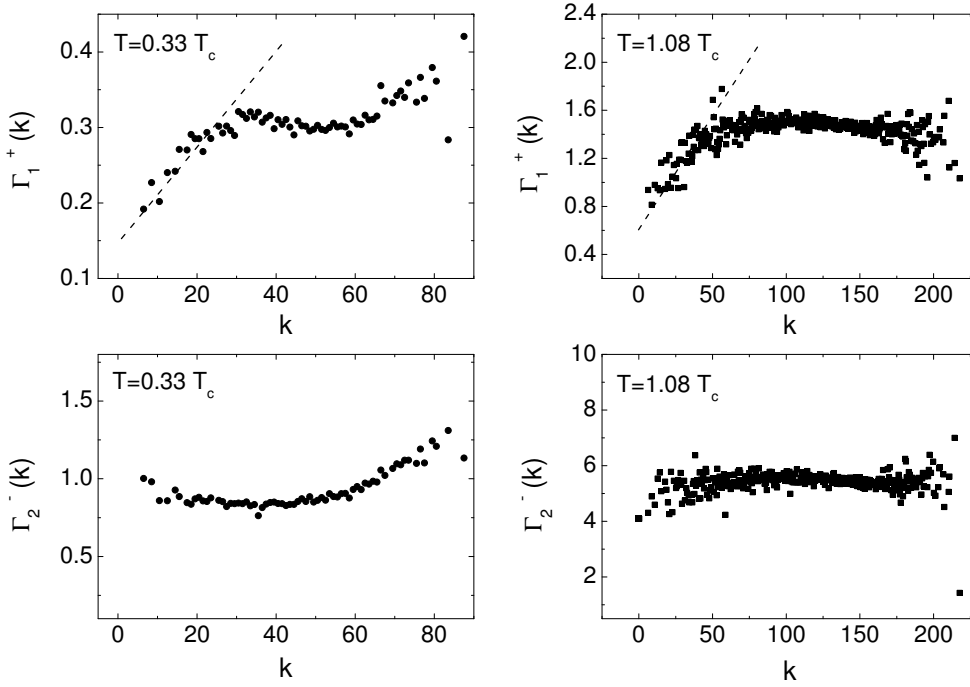
Uproszczenie opisu, poprzez pominięcie szerokości pików, jest możliwe tylko w przypadku analizy wielkości, na które to poszerzenie nie ma dużego wpływu. Skończona szerokość pików istnieje na skutek oddziaływania, gdy cząstki i antycząstki mogą zanikać w jednym modzie i pojawiać się w innym. Szerokość pików, charakteryzująca czas zaniku do innych modów, nazywać będziemy tłumieniem⁸. Wartość numeryczną tłumienia możemy oszacować w ramach metody pól klasycznych. Tłumienie cząstek, zdefiniowane jako połówkowa szerokość pików w widmie amplitud, obliczamy w następujący sposób:

$$\Gamma_1^+(\mathbf{k}) = 0.5 \left(\langle \nu_1^+(\mathbf{k})^2 \rangle - \langle \nu_1^+(\mathbf{k}) \rangle^2 \right)^{1/2}, \quad (4.102)$$

podobnie obliczamy tłumienie antycząstek:

$$\Gamma_2^-(\mathbf{k}) = 0.5 \left(\langle \nu_2^-(\mathbf{k})^2 \rangle - \langle \nu_2^-(\mathbf{k}) \rangle^2 \right)^{1/2}, \quad (4.103)$$

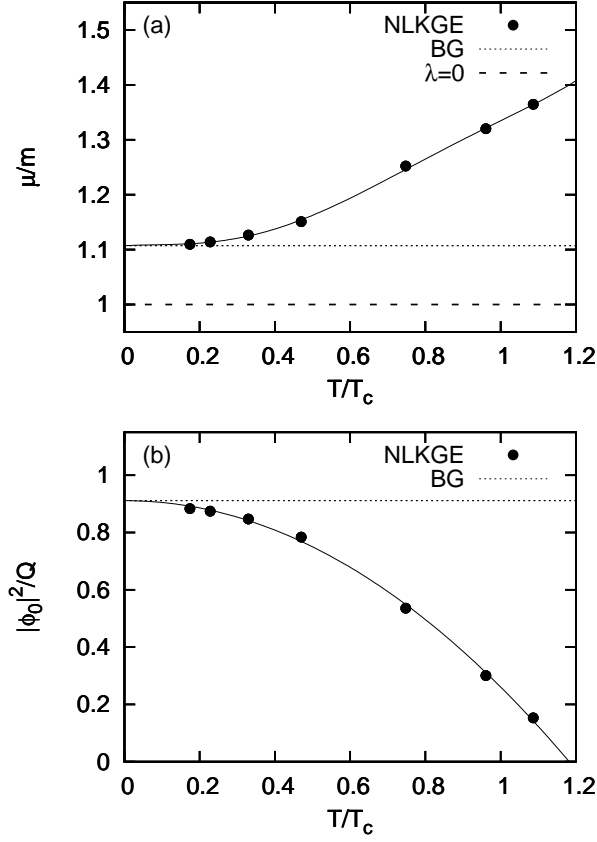
⁸Szerokość pików jest proporcjonalna do odwrotności czasu zaniku cząstek (antycząstek) w danym modzie.



Rysunek 4.7: Szerokości pików obliczone zgodnie z (4.102) w funkcji wektora falowego $k = |\mathbf{k}|$ dla cząstek $\Gamma_1^+(\mathbf{k})$, oraz antycząstek $\Gamma_2^-(\mathbf{k})$. Wyniki symulacji numerycznych uśredniono dodatkowo po $k = |\mathbf{k}|$. Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych, a linie dodane są dla prowadzenia oka. Parametry symulacji to: lewa kolumna – dla temperatur $T = 0.33T_c$ (16^3 modów), prawa kolumna – dla $T = 1.08T_c$ (40^3 liczby punktów na sieci), masa $m = 60$, oraz ładunek $Q = 1.25 \times 10^5$. T_c jest charakterystyczną temperaturą, w której pojawia się makroskopowy ładunek w $\mathbf{k} = 0$, temperatura ta będzie wyznaczona w dalszej części rozdziału.

gdzie $\nu_{1,2}^\pm(\mathbf{k})$ są obliczane zgodnie z (4.79). Na rysunku 4.7 przedstawione są wyniki rachunków numerycznych (dodatkowo uśrednione po kierunku \mathbf{k}). W pierwszym wierszu pokazujemy tłumienie cząstek $\Gamma_1^+(\mathbf{k})$ dla temperatur $T_1 = 0.33T_c$ i $T_2 = 1.08T_c$, (T_c jest pierwszą temperaturą krytyczną, która w następnym podrozdziale obliczona zostanie na podstawie położenia maksimum fluktuacji ładunku w modzie o zerowej energii). W drugim wierszu pokazujemy tłumienie antycząstek $\Gamma_2^-(\mathbf{k})$ dla tych samych temperatur.

Rachunki numeryczne sugerują, że w zakresie małych pędów, dla których relacja dyspersyjna jest liniowa, stała tłumienia cząstek jest również liniowa. Podobnie, dla małych pędów zmienia się tłumienie w teorii nierelatywistycznej. Dla dużych $k = |\mathbf{k}|$ tłumienie cząstek słabo zależy od pędu. Widzimy również, że tłumienie antycząstek słabo zależy od k . Dodatkowo, zarówno tłumienie cząstek jak i antycząstek rośnie z temperaturą. Zauważmy, że szerokości pików dla antycząstek $\Gamma_2^-(\mathbf{k})$ są średnio cztery razy większe, niż dla cząstek $\Gamma_1^+(\mathbf{k})$.



Rysunek 4.8: (a) potencjał chemiczny unormowany do masy m , oraz (b) amplituda kondensatu $|\phi_0|^2/Q$. Punkty odpowiadają symulacjom numerycznym, linia kropkowana to przybliżenie Bogoliubowa, a linia ciągła dodana jest dla przewodzenia oka. Ładunek wynosi 1.25×10^5 . Parametry symulacji: $m = 60$, $\lambda Q = 900$, oraz liczba punktów na siatce i energia odpowiednio (od najniższej temperatury): $E = 65$, $N = 10^3$; $E = 67$, $N = 12^3$; $E = 75$, $N = 16^3$; $E = 96$, $N = 20^3$; $E = 120$, $N = 24^3$; $E = 160$, $N = 27^3$; $E = 200$, $N = 30^3$; $E = 230$, $N = 32^3$; $E = 360$, $N = 36^3$; $E = 496$, $N = 40^3$.

Oznacza to, że w wyniku oddziaływań antycząstki szybciej zanikają do innych modów.

Stałe tłumienia, zarówno dla cząstek jak i dla antycząstek, są rzędu jedności nawet w temperaturze T_2 (patrz rysunek 4.7), i w porównaniu z energiami cząstek $\nu_1^+(\mathbf{k})$ oraz antycząstek $\nu_2^-(\mathbf{k})$ są małą liczbą. Dlatego, jak to pokażemy, możemy przybliżyć analityczną postać pola przez (4.83), pod warunkiem, że uwzględnimy zmianę z temperaturą potencjału chemicznego i amplitudy kondensatu. W przybliżeniu Bogoliubowa, obie te wielkości nie zależą od temperatury, podczas gdy w ramach metody pól klasycznych możemy oszacować ich wartość dla dowolnej temperatury.

Potencjał chemiczny zadany jest pozycją najwyższego pików w modzie o ze-

rowej energii, obliczamy go numerycznie w następujący sposób:

$$\mu = \frac{\sum_{\nu \in S} \nu |B_{k=0}(\nu)|^2}{\sum_{\nu \in S} |B_{k=0}(\nu)|^2}, \quad (4.104)$$

gdzie sumowanie przebiega w obrębie pików, na obszarze S . Wartość $|\phi_0|^2/Q$ jest uśrednioną amplitudą tego pików, obliczaną numerycznie według:

$$\frac{|\phi_0|^2}{Q} = \sum_{\nu \in S} |B_{k=0}(\mu)|^2. \quad (4.105)$$

Na rysunku 4.8a pokazana jest zależność potencjału chemicznego μ od temperatury. Wynik symulacji numerycznych oznaczony punktami pokazuje, że potencjał chemiczny jest rosnącą funkcją temperatury. Na tej podstawie możemy wnioskować, że oddziaływanie wpływa na wartość potencjału chemicznego, który w przypadku nieoddziałującym jest równy masie m . Dla niskich temperatur, kiedy przybliżenie Bogoliubowa jest słuszne, obserwujemy zgodność wyniku analitycznego z wynikiem numerycznym, podczas gdy dla temperatur wysokich, wyniki symulacji numerycznych i przybliżenia Bogoliubowa znacznie się różnią. Zależność od temperatury amplitudy maksimum modu o zerowej energii jest szczególnie ciekawa i wskazuje na to, że w naszym układzie istnieje kondensat Bosego-Einsteina⁹. Jak widać na rysunku 4.8b, przybliżenie Bogoliubowa poprawnie wyznacza wartość $|\phi_0|^2$ tylko dla niskich temperatur.

Podsumowując, procedura Bogoliubowa wyznacza poprawne wartości μ i $|\phi_0|^2$ tylko dla temperatur bliskich zera. W szczególności dla temperatur rzędu temperatury krytycznej obserwujemy znaczną różnicę. Dlatego, chcąc stosować wzory analityczne otrzymane w przybliżeniu Bogoliubowa, należy uwzględnić zmianę tych wielkości z temperaturą. Na przykładach widma wzbudzeń, współczynników γ_1 , γ_2 , oraz ładunku cząstek, pokażemy, że wzory procedury Bogoliubowa z zależnymi od temperatury μ i ϕ_0 są poprawne w całym zakresie temperatur $T < T_c$.

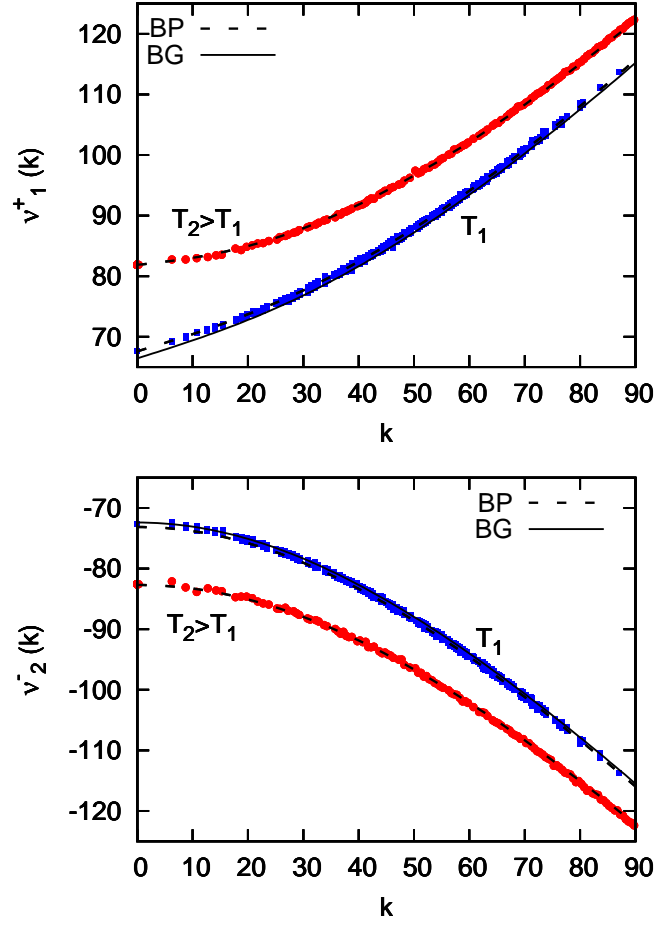
Koncentrujemy się na analizie energii wzbudzeń $\mu + \omega_1(\mathbf{k})$, $\mu - \omega_2(\mathbf{k})$, współczynników $\gamma_1(\mathbf{k})$, $\gamma_2(\mathbf{k})$ i ładunku cząstek obliczonych przez: (i) numeryczne symulacje klasycznego pola (na rysunkach oznaczane punktami), (ii) procedurę Bogoliubowa z potencjałem chemicznym μ i $|\phi_0|^2$ spełniającymi układ równań¹⁰ (na rysunkach oznaczone jako *BG*):

$$\mu_B^2 = m^2 + \lambda |\phi_0|^2, \quad (4.106)$$

$$Q = \frac{\mu_B}{m} |\phi_0|^2, \quad (4.107)$$

⁹Zagadnienie kondensacji, a w szczególności analiza temperatury krytycznej będzie tematem następnego podrozdziału.

¹⁰patrz przykład 5

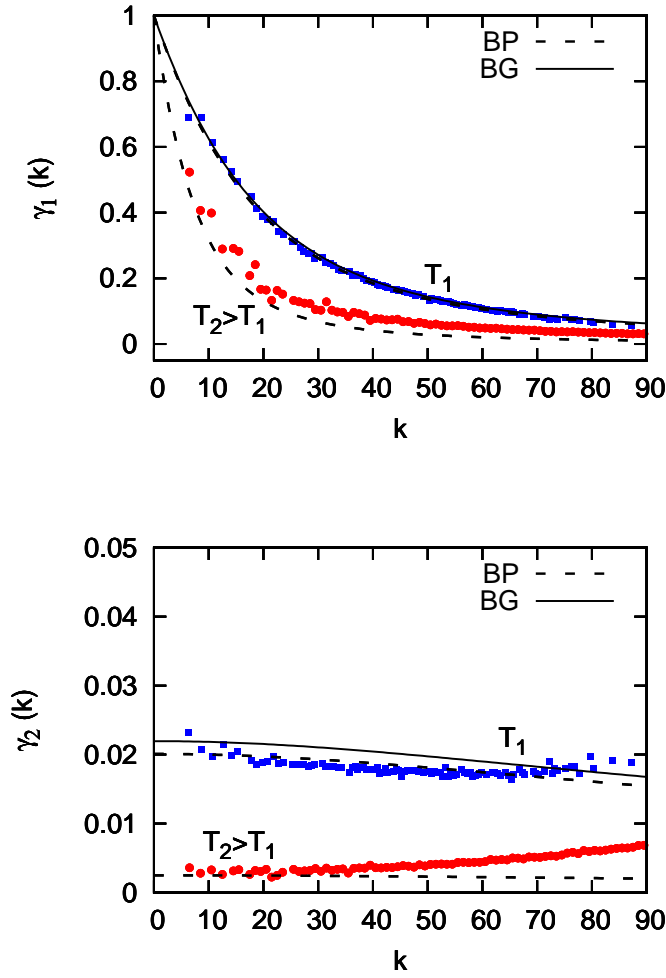


Rysunek 4.9: Energie wzbudzeń $\nu_1^+(\mathbf{k})$, oraz $\nu_2^-(\mathbf{k})$ w funkcji wektora falowego $k = |\mathbf{k}|$. Punkty zaznaczone kolorem niebieskim odpowiadają symulacjom numerycznym dla $E_1 = 75$, $T_1 = 0.33T_c$, oraz liczby punktów na sieci 16^3 , podczas gdy punkty oznaczone kolorem czerwonym odpowiadają wynikom symulacji numerycznych dla $E_2 = 500$, $T_2 = 1.08T_c$, i liczby punktów na sieci 40^3 . Linia ciągła *BG* to wynik przybliżenia Bogoliubowa, a linie przerywane *BP* oznaczają rezultat otrzymany w przybliżeniu Bogoliubowa-Popowa.

oraz (*iii*) procedurę Bogoliubowa z wartościami potencjału chemicznego μ , oraz $|\phi_0|^2$ wziętymi z rachunków numerycznych, którą nazywać będziemy przybliżeniem Bogoliubowa–Popowa (oznaczone jako *BP*).

Widmo wzbudzeń

Na rysunku 4.9 porównujemy obliczone numerycznie częstości $\nu_1^+(\mathbf{k})$ z wynikiem procedury Bogoliubowa $\mu + \omega_1$, oraz $\nu_2^-(\mathbf{k})$ z $\mu - \omega_2$. Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych dla dwóch różnych temperatur. Wynik otrzymany w temperaturze $T_1 = 0.33T_c$ oznaczony jest kolorem niebieskim, podczas gdy rezultaty otrzymane w temperaturze $T_2 = 1.08T_c$ zaznaczone



Rysunek 4.10: Współczynniki $\gamma_1(\mathbf{k})$ oraz $\gamma_2(\mathbf{k})$ w funkcji $k = |\mathbf{k}|$. Kolorem niebieskim oznaczono wyniki symulacji numerycznych dla $E_1 = 75$, $T_1 = 0.33T_c$ i liczby punktów na sieci 16^3 , podczas gdy kolorem czerwonym zaznaczono wyniki symulacji numerycznych dla $E_2 = 500$, $T_2 = 1.08T_c$, oraz liczby punktów na sieci 40^3 . Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych dodatkowo uśrednionych po kierunkach \mathbf{k} . Linia ciągła BG – to wynik przybliżenia Bogoliubowa, a linie przerywane BP – przybliżenia Bogoliubowa-Popowa.

są kolorem czerwonym. Linia ciągła przedstawia wynik przybliżenia Bogoliubowa (BG), a linie przerywane to rezultaty przybliżenia Bogoliubowa-Popowa (BP). Dla niskiej temperatury T_1 wszystkie linie są bardzo blisko, natomiast dla temperatury wysokiej T_2 w widmie cząstek znika prawie całkowicie część fononowa. W widmie antycząstek obserwowane jest przesunięcie. Wszystkie te zmiany są dobrze opisane przez zależne od temperatury widmo Bogoliubowa-Popowa.

Współczynniki γ_1 i γ_2

Współczynniki γ_1 , oraz γ_2 , które w przybliżeniu Bogoliubowa zadane są przez analityczne wzory (4.39) i (4.40), obliczaliśmy numerycznie w sposób następujący:

$$\gamma_1(\mathbf{k}) = \frac{|\mathcal{A}_1^-(\mathbf{k})|}{|\mathcal{A}_1^+(\mathbf{k})|}, \quad (4.108)$$

$$\gamma_2(\mathbf{k}) = \frac{|\mathcal{A}_2^+(\mathbf{k})|}{|\mathcal{A}_2^-(\mathbf{k})|}. \quad (4.109)$$

Na rysunku 4.10 zestawiono numerycznie obliczone współczynniki γ_1 i γ_2 z wynikami procedury Bogoliubowa, oraz Bogoliubowa–Popowa. Punkty odpowiadają uśrednionym po kątach \mathbf{k} wynikom symulacji numerycznych. Kolorem niebieskim zaznaczono wyniki symulacji numerycznych dla $E_1 = 75$, $T_1 = 0.33T_c$, oraz siatki 16^3 , natomiast kolorem czerwonym oznaczono wyniki numeryczne dla $E_2 = 500$, $T_2 = 1.08T_c$ i siatki 40^3 . Linia ciągła to wynik przybliżenia Bogoliubowa, podczas gdy linie przerywane oznaczają wynik w przybliżeniu Bogoliubowa–Popowa. Zgodność wyników jest taka sama jak w przypadku energii wzbudzeń. Przybliżenie Bogoliubowa poprawnie opisuje eksperyment numeryczny tylko dla energii rzędu m , podczas gdy dla wyższych energii tylko przybliżenie Bogoliubowa–Popowa poprawnie opisuje eksperyment numeryczny.

Efektywny ładunek cząstek

W podrozdziale 4.2.4 obliczyliśmy postać ładunku w przybliżeniu Bogoliubowa:

$$Q \approx \frac{\mu}{m} |\phi_0|^2 + q_A(0) N_0^A + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (q_P(\mathbf{k}) N_{\mathbf{k}}^P + q_A(\mathbf{k}) N_{\mathbf{k}}^A) + \mathcal{C}. \quad (4.110)$$

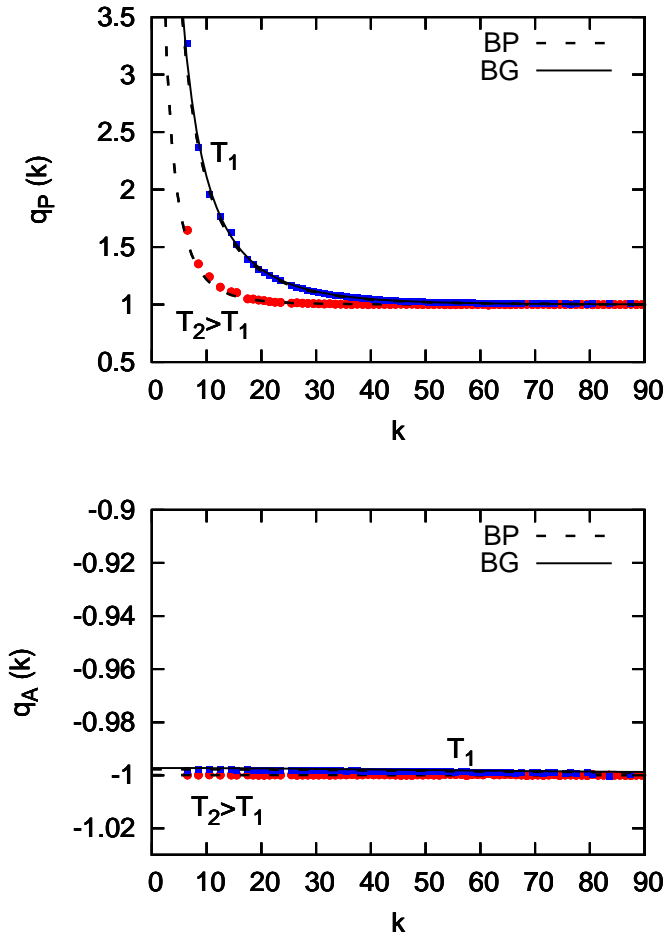
W szczególności, zidentyfikowaliśmy ładunek cząstek i antycząstek:

$$q_P(\mathbf{k}) = \frac{2\mu}{\omega_1} \frac{L_{\mathbf{k}} + \omega_1^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \quad (4.111)$$

$$q_A(\mathbf{k}) = -\frac{2\mu}{\omega_2} \frac{L_{\mathbf{k}} + \omega_2^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2}, \quad (4.112)$$

oraz wyraz \mathcal{C} będący wynikiem zastosowania realcji komutacyjnych:

$$\mathcal{C} = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ |f_{\mathbf{k}}|^2 |\gamma_1|^2 \left(1 + \frac{\omega_1(\mathbf{k})}{\mu} \right) + |g_{\mathbf{k}}|^2 |\gamma_2|^2 \left(1 - \frac{\omega_2(\mathbf{k})}{\mu} \right) \right\}. \quad (4.113)$$



Rysunek 4.11: Ładunek cząstek q_k^P i antycząstek q_k^A dla temperatur: 1) $T_1 = 0.33T_c$ (niebieskie punkty) oraz 2) $T_2 = 1.08T_c$ (czerwone punkty). Punkty odpowiadają implementacji wzorów (4.111, 4.112) z wartościami ω_1 , ω_2 , μ i $|\phi_0|^2$ obliczonymi numerycznie, linia przerywana to wynik otrzymany w przybliżeniu Bogolibowa–Popowa, a linia ciągła oznacza rezultat uzyskany w przybliżeniu Bogoliubowa. Oddziaływanie wpływa tylko na ładunek cząstek. Ładunek antycząstek jest taki sam jak w przypadku nieoddziałującym.

Wyraz ten jest relatywistycznym odpowiednikiem tzw. kwantowego zubożenia (ang. *quantum depletion*), i jest to małą liczbą w porównaniu z Q ¹¹.

Na rysunku 4.11 przedstawiono q_P oraz q_A w funkcji pędu. Punkty odpowiadają przypadkowi, w którym ω_1 , ω_2 , μ i $|\phi_0|^2$ są obliczone numerycznie, linia przerywana to wynik otrzymany w przybliżeniu Bogolibowa–Popowa, oraz linia ciągła to rezultat otrzymany w przybliżeniu Bogoliubowa.

Ładunek antycząstek q_A nie zależy od pędu oraz temperatury. Wszystkie wyniki, zarówno numeryczny, jak i wyniki otrzymane w przybliżeniach Bogoliubowa i Bogoliubowa–Popowa, układają się blisko linii $q_A = -1$, tak jak w przypadku braku oddziaływań. Natomiast ładunek cząstek zależy od pędu i temperatury. Dla małych $k = |\mathbf{k}|$, dla których relacja dyspersyjna jest liniowa, ładunek cząstek jest większy od jeden $q_P > 1$, po czym maleje z k tak, że dla dużych pędów ładunek cząstek q_P jest rzędu jedności. Dodatkowo, dla temperatury $T = 0.33T_c$ (niebieskie punkty) obserwujemy zgodność implementacji numerycznej, przybliżenia Bogoliubowa i Bogoliubowa–Popowa. Jednakże, dla temperatur wysokich $T = 1.08T_c$ (punkty czerwone) jedynie przybliżenie Bogoliubowa–Popowa poprawnie opisuje ładunek cząstek.

Na podstawie analizowanych wielkości, możemy stwierdzić, że procedura Bogoliubowa dobrze opisuje eksperyment numeryczny tylko dla niskich temperatur. W celu poprawnego, uproszczonego opisu analitycznego w rejonie temperatur bliskich temperatury krytycznej należy zastosować przybliżenie Bogoliubowa–Popowa.

4.5 Kondensat Bosego–Einsteina relatywistycznych cząstek

Pokazaliśmy już, że równanie Kleina–Gordona w obszarze niskich energii może opisać kondensat Bosego-Einsteina relatywistycznych bozonów. W tej części analizujemy charakterystyczną temperaturę, w której zachodzi przejście do stanu kondensatu.

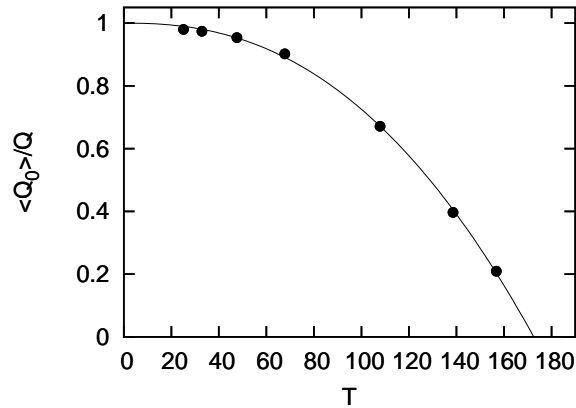
Ładunek zgromadzony w modzie o zerowej energii można obliczyć na dwa sposoby. Pierwszy opiera się na wynikach procedury Bogoliubowa–Popowa, t.j.:

$$Q_0 = \frac{\mu}{m} |\phi_0|^2 + q_A(0) N_0^A, \quad (4.114)$$

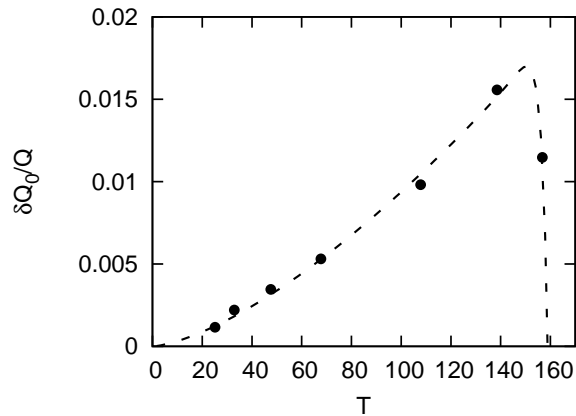
gdzie μ oraz $|\phi_0|^2$ są wyznaczone numerycznie z widma amplitud. Drugi sposób to analiza pola w przestrzeni pędów:

$$\langle Q_0 \rangle = \frac{i}{2m} \left(\langle \Psi^*(k=0) \dot{\Psi}(k=0) \rangle - \langle \Psi(k=0) \dot{\Psi}(k=0)^* \rangle \right), \quad (4.115)$$

¹¹Wartość kwantowego zubożenia wynosi $C/Q = 0.00025$, dla $m = 60$, $\lambda Q = 900$, oraz $\mathbf{k}_{max} = 2\pi(8, 8, 8)$.



Rysunek 4.12: Ładunek zgromadzony w modzie o zerowej energii $\langle Q_0 \rangle / Q$ w funkcji temperatury. Punkty oznaczają wyniki symulacji numerycznych, linia ciągła to funkcja $g(T) = 1 - (T/T_c)^a$ z dopasowanymi parametrami $T_c = 172.6$, $a = 2.37$. Poszczególne parametry wynoszą: $m = 60$, $Q\lambda = 900$, $Q = 1.25 \times 10^5$, liczba modów i energie takie same jak na rysunku 4.8.



Rysunek 4.13: Fluktuacje frakcji ładunku w modzie o zerowej energii $\delta Q_0 / Q$ w funkcji temperatury. Punkty odpowiadają wynikom symulacji numerycznych, natomiast linia ciągła jest funkcją $f(T) = A((T/T_c)^B - (T/T_c)^D \log(T/T_c))$ dopasowaną do punktów. Dopasowanie pozwoliło na oszacowanie wartości $T_c \sim 150$, oraz $A \sim 0.017$, $B \sim 1.47$, $D \sim 49.76$. Parametry symulacji takie same jak na rysunku 4.12.

gdzie $\langle \cdot \rangle$ oznacza średnią po czasie. Obydwa sposoby prowadzą do tego samego wyniku. W tej części prezentujemy wyniki rachunku wykonanego drugą metodą.

Na rysunku 4.12 pokazujemy temperaturową zależność ładunku zgromadzonego w modzie o zerowej energii, ładunek ten unormowany jest do całkowitego ładunku $Q = 1.25 \times 10^5$. Jak widać, poniżej temperatury $T = 160$ znaczna frakcja ładunku znajduje się w modzie o zerowej energii, i już dla wartości $T = 50$ praktycznie cały ładunek gromadzi się w stanie o najniższej energii.

Wyznaczenie charakterystycznej temperatury, w której następuje makroskopowe gromadzenie ładunku w $\mathbf{k} = 0$, w przypadku rozważanego skończonego układu nie jest jednoznaczne. Możemy ją jednoznacznie zdefiniować tylko w granicy termodynamicznej. W układach o skończonej liczbie cząstek, gdzie przejści fazowe nie występuje, pojęcie temperatury krytycznej jest trudne do zdefiniowania. Obserwuje się raczej zakres temperatur, w których układ się zmienia. Mimo to, możemy określić pewną charakterystyczną temperaturę, poniżej której gwałtownie rośnie frakcja ładunku w modzie o $k = 0$. Jedną z możliwych ilościowych ocen temperatury charakterystycznej jest wyznaczenie temperatury, przy której fluktuacje ładunku w modzie o zerowej energii są maksymalne. W granicy termodynamicznej jej wartość staje się równa temperaturze krytycznej, jak to pokazano w przypadku nierelatywistycznym [54]. Drugi niezależny rachunek wyznaczający temperaturę charakterystyczną opiera się na wynikach modelu pola nieoddziałującego. Wiadomo [46], że frakcja ładunku w modzie o zerowej energii nieoddziałującego gazu relatywistycznego w granicy termodynamicznej jest dana zależnością $1 - (T/T_c)^a$, gdzie $a = 2$. W przypadku skończonego układu nie będziemy obserwować gwałtownego spadku do zera w $T = T_c$, lecz punkt przegięcia i stopniowy zanik. Stosowaną w literaturze definicją temperatury charakterystycznej jest położenie tego punktu przegięcia. Ze względu na brak danych dla dużych T , gdzie metoda pól klasycznych nie jest dobrym przybliżeniem, na rysunku 4.12 nie obserwujemy przegięcia. Dlatego w rozważanym przypadku temperaturę charakterystyczną szacujemy na podstawie dopasowania funkcji $1 - (T/T_c)^a$ do danych numerycznych.

Oszacowanie pierwszej charakterystycznej temperatury zaczniemy od analizy fluktuacji ładunku w $k = 0$. Fluktuacje ładunku w modzie o zerowej energii definiujemy w następujący sposób:

$$\frac{\delta Q_0}{Q} = \left(\frac{\langle Q_0^2 \rangle}{Q^2} - \frac{\langle Q_0 \rangle^2}{Q^2} \right)^{1/2}, \quad (4.116)$$

gdzie $\langle \cdot \rangle$ oznacza średnią po czasie. Na rysunku 4.13 przedstawiono fluktuacje frakcji ładunku w modzie zerowym w funkcji temperatury. Punkty oznaczają wyniki symulacji numerycznych, natomiast linia to dopasowanie krzywej typu: $f(T) = A((T/T_c)^B - (T/T_c)^D \log(T/T_c))$. Dopasowanie wyznaczyło temperaturę charakterystyczną $T_c \sim 150$, pozostałe parametry dopasowania to $A \sim 0.017$, $B \sim 1.47$, $D \sim 49.76$.

Jak już wspomnieliśmy, drugą temperaturę charakterystyczną obliczamy na podstawie zmian ładunku w modzie o zerowej energii. Do wyników symulacji numerycznych dopasowaliśmy krzywą $g(T) = 1 - (T/T_c)^a$, co pozwoliło oszacować wartość drugiej temperatury charakterystycznej $T_c \sim 172.6$ i zależności

potęgowej $a = 2.37$.

Jak widać, temperatura charakterystyczna wyznaczona na podstawie analizy fluktuacji ładunku w modzie o zerowej energii jest niższa niż temperatura obliczona drugim sposobem. Takie przesunięcie również obserwowane jest w przypadku nierelatywistycznym [55] Różnica w otrzymanych wartościach temperatur krytycznych jest dość znaczna. Jest ona bezpośrednim wynikiem rozważanego tu skończonego układu i wyznacza obszar gwałtownej zmiany frakcji ładunku w modzie o zerowej energii. Możemy się spodziewać, że w granicy termodynamicznej wartości obu temperatur charakterystycznych przybiorą wartość temperatury krytycznej, tak jak w przypadku nierelatywistycznym [54].

Oszacowanie temperatury charakterystycznej jest obarczone błędem i możemy spodziewać się jedynie, że dobrze obliczyliśmy rząd wielkości. Błąd oszacowania wynika nie tylko z dokładności dopasowania krzywych, lecz przede wszystkim, z ograniczenia metody pól klasycznych. Ze względu na swobodny parametr, jakim jest pęd obciążenia, możemy wyznaczyć temperaturę tylko co do rzędu wielkości. Wystarczy zmienić wartość obsadzenia modu o maksymalnej energii z 1 na 2, a temperatura wzrośnie dwa razy.

Uwagi

1. Na przykładzie analizy widma wzbudzeń, potencjału chemicznego i ładunku w modzie zerowym sprawdziliśmy, że metoda pól klasycznych poprawnie opisuje układ relatywistycznych bozonów w niskich temperaturach $T < T_c$. Wyniki przedstawione w tym rozdziale pokazują, że metoda pól klasycznych może być zastosowana do opisu relatywistycznego pola bozonowego, i jest alternatywną metodą do innych używanych technik.
2. Pokazaliśmy, że w układzie istnieją dwa rodzaje wzbudzeń o różnych energiach wzbudzeń. Na podstawie ich relacji dyspersyjnych wnioskujemy, że kondensacji podlegają tylko cząstki, ponieważ dla nich pojawia się typowe fononowe widmo wzbudzeń. Antycząstki nie kondensują, a ich widmo wzbudzeń jest takie jak dla masywnych, relatywistycznych bozonów. Cząstki kondensują dlatego, że są wyróżnione przez warunek początkowy $Q > 0$, ich liczba przewyższa liczbę cząstek. Ze względu na symetrię, w układzie o ujemnym ładunku $Q < 0$ przeprowadzona analiza byłaby nadal słuszna, lecz skondensowałyby antycząstki.

5 Podsumowanie wyników

W niniejszej pracy przedstawiono wyniki badań numerycznych wykonanych metodą pól klasycznych, oraz wyniki rachunków analitycznych wykonanych metodą Bogoliubowa. Obie metody są standartowymi metodami badawczymi do opisu własności kondensatu Bosego–Einsteina. O ile metoda Bogoliubowa, jest poprawna jedynie w temperaturach bliskich zera, to metoda pól klasycznych może być stosowana w temperaturach bliskich krytycznej. Prostota implementacji metody pól klasycznych sprawia, że ma ona niezwykle szerokie możliwości zastosowania.

Skuteczność metody pól klasycznych jest zaskakująca. Opisując zjawiska kwantowe, jakim jest kondensat, używamy klasycznego pola reprezentowanego przez zespoloną amplitudę. Takie uproszczenie opisu jest możliwe jeśli założymy, że wszystkie uwzględnione mody są makroskopowo obsadzone, podczas gdy pominięte mody są puste. Ograniczenie liczby modów wprowadza dodatkowy parametr obciążenia, który należy odpowiednio dobrać.

Zaskakująca możliwość opisu efektów kwantowych za pomocą pól klasycznych stała się motywacją do rozważań drugiego rozdziału. Głównym zadaniem było zrozumienie w jaki sposób stała Plancka pojawia się w opisie układu. Dlatego rozważany był czysto klasyczny układ: rzeczywiste pole wychyleń oscylatorów oddziałujących nieliniową lokalną siłą. Analiza przestrzennej gęstości energii, pozwoliła ustalić, który z elementów jest odpowiedzialny za pojawienie się stałej Plancka. Rachunek ten pokazał, że jeśli chcemy odtworzyć kwantowy rozkład energii to musimy uwzględnić skończoną liczbę modów, a prawidłowe ustalenie obciążenia wprowadza stałą Plancka. Wynik ten jest niezwykle istotny, gdyż pokazuje prawdziwą rolę parametru obciążenia. Parametru związanego nie tylko z numeryczną implementacją bądź też samouzgodnieniem metody. Jego istnienie i poprawna wartość pozwala w pewnych przypadkach na uproszczenie opisu kwantowego pola i zastąpienie go przez pole klasyczne, oraz na interpretację wyników w języku teorii kwantowej.

W rozdziale trzecim pokazaliśmy praktyczne zastosowanie metody pól klasycznych. Zbadaliśmy dynamikę funkcji korelacji, w szczególności: wariację fazy kondensatu oraz dwuczasową funkcję korelacji liczby atomów w kondensacie. Pokazaliśmy, że dwuczasowa funkcja korelacji w naszym układzie nie zanika do zera dla długich czasów. Nieskończony czas korelacji atomów skondensowanych istnieje na skutek zachowania energii w układzie, które wprowadza pewne korelacje między amplitudami modów. To istotny wynik, zważywszy że niektórzy autorzy [36] zakładają zanikanie korelacji i na takiej podstawie

wyznaczają inne wielkości. Drugim wynikiem prezentowanym w tym rozdziale jest wykazanie kwadratowej zależności od czasu i temperatury wariancji fazy kondensatu. Mechanizm zależności czasowej jest dokładnie taki sam jak poprzednio: na skutek zachowania energii podczas ewolucji układu wprowadzone zostały dodatkowe korelacje między amplitudami modów. To pierwszy wynik uwzględniający ergodyczność dynamiki, sprawdzony niezależnymi dwoma rachunkami. Dotychczas, pojawiły się dwie prace, które analizują problem dynamiki fazy w niezerowej temperaturze. Wspomniana już wcześniej, praca *Grahama* [36] pokazuje liniową czasową zależność wariancji fazy. Autor założył jednak, że dwuczasowa funkcja korelacji liczby atomów w kondensacie dla długich czasów zanika do zera. Nasz rachunek pokazał, że jest to błędne założenie. Drugi wynik autorstwa *Kuklova* [37], operujący się na przybliżeniu Bogoliubowa, pokazuje kwadratową zależność wariancji fazy od czasu. Nasze rachunki wykonane w teorii Bogoliubowa również odtwarzają taką zależność, ale wyniki symulacji numerycznych dały inny współczynnik proporcjonalności, i dopiero rachunek oparty na hipotezie ergodycznej wyznaczył jego prawidłową wartość. Wykrycie mechanizmu związanego z zachowaniem energii jest ważnym wynikiem, gdyż umożliwia obliczanie zwięzłych analitycznych formuł prawidłowo przewidujących długoczasowe zachowanie funkcji korelacji nawet w temperaturach bliskich temperaturze krytycznej.

Niestandardowe zastosowanie metody pól klasycznych do teorii nieliniowego pola Kleina-Gordona wykazało jej skuteczność w innych układach. Wyniki przedstawione w rozdziale czwartym, wykazują możliwość zastosowania metody pól klasycznych w teorii pola. Wykonaliśmy rachunki numeryczne, oraz analityczne w ramach procedury Bogoliubowa. Wykazaliśmy, że w układzie opisanym nieliniowym równaniem Kleina-Gordona istnieją dwa typy wzbudzeń: cząstki i antycząstki. W ramach procedury Bogoliubowa obliczyliśmy energie wzbudzeń, i pokazaliśmy, że przybliżenie Bogoliubowa-Popowa jest poprawne nawet w temperaturach $T \sim T_c$. Widmo elementarnych wzbudzeń otrzymane metodą Bogoliubowa odtworzyło wynik *Bernstein'a* [44]. W tym samym rzędzie rozwinięcia wyznaczyliśmy diagonalną postać hamiltonianu i ładunku, oraz obliczyliśmy ładunek cząstek i antycząstek. Wykazaliśmy, że oddziaływanie zmienia wartość ładunku cząstek o małych pędach. Ładunek antycząstek bardzo słabo zależy od pędu i jest taki sam jak ładunek antycząstek nieoddziałujących. Za pomocą metody pól klasycznych badaliśmy temperaturową zależność potencjału chemicznego, oraz ładunku zgromadzonego w modzie o zerowym pędzie. Obie wielkości zmieniają swoją wartość pod wpływem oddziaływania i temperatury. Pokazaliśmy, że potencjał chemiczny rośnie z temperaturą, a ładunek w modzie zerowym maleje. Oba wyniki są jako-

ściowo zgodne z rachunkami *Haber'a* [45], co wykazuje skuteczności metody w rozważanym układzie. Dodatkowo obliczyliśmy czas życia cząstek i antycząstek. Pokazaliśmy, że cząstki zderzają się rzadziej niż antycząstki, których charakterystyczny czas życia jest średnio cztery razy mniejszy. Obliczyliśmy również fluktuacje ładunku w modzie o zerowej energii. Jest to pierwszy wynik pokazujący zakres jego fluktuacji. Wykazaliśmy, że fluktuacje rosną aż do pewnej maksymalnej wielkości, po czym zaczynają zanikać. Położenie maksimum fluktuacji pozwoliło na zdefiniowanie temperatury charakterystycznej T_c . Poniżej tej temperatury układ zaczyna się gwałtownie zmieniać – przechodzi do stanu skondensowanego.

Wszystkie przedstawione cząstkowe wyniki prowadzą do najciekawszego wniosku. W niskich temperaturach ($T < T_c$) układ wielu oddziałujących bozonów można opisywać klasycznym polem. Wyrażenie 'pole klasyczne' zostało użyte w znaczeniu opisu, w którym ziarnistość pola została pominięta. Można tak uczynić jedynie, gdy rozważane pole jest silne tzn. wszystkie uwzględnione stany są obsadzone makroskopowo.

Bibliografia

- [1] K. Góral, M. Gajda, K. Rzażewski, *Opt. Express* **8**, 92 (2001);
M. Brewczyk, P. Borowski, M. Gajda, K. Rzażewski, *J. Phys. B* **37**, 2725 (2004);
M. Brewczyk, M. Gajda, K. Rzażewski, *J. Phys. B* **40**, R1-R37 (2007);
- [2] A. Sinatra, C. Lobo, Y. Castin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, 3599-3631 (2002);
A. Sinatra, C. Lobo, Y. Castin, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 210404 (2001);
- [3] M. J. Davis and S. A. Morgan, *Phys. Rev. A* **68**, 053615 (2003);
M. J. Davis and P. B. Blakie, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 10259 (2005);
- [4] O. Penrose, L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956);
- [5] A. Einstein, *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.* **1**, 3 (1925);
A. Einstein, *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.* **22**, 261 (1924);
- [6] S.N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924);
- [7] M.H. Anderson, J.H. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995);
- [8] K.B. Davies, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995);
- [9] J.R. Ensher, D.S. Jin, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4984 (1996);
- [10] I. Bloch, T.W. Hansch, T. Esslinger, *Nature* **403**, 166 (2000);
- [11] M.R. Andrews, C.G. Tausend, H.-J. Niesner, D.S. Durfee, D.M. Kurl, W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997);
- [12] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G.V. Shlyapnikov, M. Lewenstein, *Phys. Rev. Lett* **83**, 5198 (1999);
- [13] L. Khaykovich, F. Schreck, G.Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L.D. Carr, Y. Castin, C. Salomon, *Science* **296**, 1290 (2002);
- [14] L. Deng, E.W. Hagley, J. Wen, M. Trippenbach, Y. Band, P.S. Julienne, J.E. Simsarian, K. Helmerson, S.L. Rolston, W.D. Phillips, *Nature* **398**, 218 (1999);

- [15] F.S. Cataliotti, S. Burger, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi, A. Trombettoni, A. Smerzi, M. Inguscio, *Science* **293**, 843 (2001);
- [16] N. N. Bogoliubow, *J. Phys. U. S. S. R.* **11**, 23 (1947);
- [17] Y. Castin, Lecture notes of the 2003 Les Houches Spring School, *Quantum Gases in Low Dimensions*, M. Olshanii, H. Perrin, L. Pricoupenko, Eds., *J. Phys. IV France* **116**, p.89-132 (2004) oraz cond-mat/0407118;
- [18] Krzysztof Sacha *Kondensat Bosego-Einsteina* (IF UJ, Kraków, 2004);
- [19] K. Huang, *emphJ. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **101**, 435 (1996);
- [20] A. Griffin, *Phys. Rev. B* **53**, 9341 (1996);
- [21] V. N. Popov, *Functional Integrals and Collective Modes*, chap 6. (Cambridge University Press, New York, 1987);
C. Pethick, H. Smith, *Bose – Einstein Condensation in Diluted Gases* (Cambridge University Press, New York, 2002);
- [22] K. Burnett, M. Edwards, C. W. Clark, *Physics Today* **37** (1999);
- [23] Ł. Zawitkowski, M. Brewczyk, M. Gajda, K. Rzażewski, *Phys. Rev. A* **70**, 033614 (2004);
- [24] D. Kadio, M. Gajda, K. Rzażewski, *Phys. Rev. A* **72**, 013607 (2005);
H. Schmidt, K. Góral, F. Floegel, M. Gajda, K. Rzażewski *J. Opt. B* **5**, S96 (2003);
K. Gawryluk, M. Brewczyk, K. Bongs, M. Gajda, cond-mat/0609061;
- [25] A. Sinatra, Y. Castin, E. Witkowska, *Phys. Rev. A* **75**, 033616 (2007);
- [26] B. V. Svistunov, *J. Mosc. Phys. Soc.* **1**, 373 (1991);
Y. Kagan, B. V. Sistunov, G. V. Shlyapnikov, *Zh. Eksp. Fiz.* **101**, 528 (1992);
Y. Kagan, B. V. Sistunov, G. V. Shlyapnikov, *Sov. Phys. – JETP* **75**, 387 (1992);
Y. Kagan, B. V. Sistunov, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3331 (1997);
- [27] M.J. Steel, M.K. Olsen, L.I. Plimak, P.D. Drummond, S.M. Tan, M.J. Collett, D.F. Walls and R. Graham, *Phys. Rev. A* **58**, 4824 (1998);
- [28] M. J. Davis, S. A. Morgan and K. Burnett *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160402 (2001);

- [29] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics* (J. Wiley, New York, 1977);
N. N. Bogoliubov, D. W. Shirkov *Introduction to the Theory of Quantized Fields* (John Wiley and Sons Inc., 1980);
- [30] L. Caiani, L. Casetti, C. Clementi, G. Pettini and R. Gatto, *Phys. Rev. E* **57**, 3886 (1998);
- [31] S. M. Ulam, E. Fermi, J. Pasta *Studies of nonlinear problem*, Analogies between Analogies (University of California Press, 1990);
Podsumowanie 50-lat badań nad układem FPU można odnaleźć w G.P. Berman and F. M. Izrailev, e-print: cond-mat/0411062;
- [32] H. H. Rugh, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 772 (1997);
H. H. Rugh, *J. Phys. A* **31**, 7761 (1998);
H. H. Rugh, *Phys. Rev. E* **64**, 055101 (2001);
- [33] Chapter I § 5 of V. B. Berestetskii, E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics* Volume 4 of *Course of Theoretical Physics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1982);
- [34] E.M. Wright, D.F. Walls, J.C. Garrison, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2158 (1996);
J. Javanainen, M. Wilkens, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4675 (1997);
M. Lewenstein, Li You, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3489 (1997);
Y. Castin, J. Dalibard, *Phys. Rev. A* **55**, 4330 (1997);
P. Villain, M. Lewenstein, R. Dum, Y. Castin, Li You, A. Imamoglu, T.A.B. Kennedy, *Journal of Modern Optics* **44**, 1775-1799 (1997);
A. Sinatra, Y. Castin, *Eur. Phys. J. D* **4**, 247-260 (1998);
- [35] M.R. Andrews, C.G. Townsend, H.J. Miesner, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, *Science* **275**, 637 (1997);
D.S. Hall, M.R. Matthews, C.E. Wieman, and E.A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1543 (1998);
C. Orzel, A.K. Tuchman, M.L. Fenselau, M. Yasuda, M. Kasevich, *Science* **291**, 2386 (2001);
M. Greiner, O. Mandel, T.W. Hansch, I. Bloch, *Nature* **419**, 51 (2002);
Y. Shin, M. Saba, T.A. Pasquini, W. Ketterle, D.E. Pritchard, A.E. Leanhardt, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 050405 (2004);
G.-B. Jo, Y. Shin, S. Will, T. A. Pasquini, M. Saba, W. Ketterle, D.E. Pritchard, M. Vengalattore, M. Prentis, cond-mat/0608585 (2006);

- [36] R. Graham, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5262 (1998);
R. Graham, *Phys. Rev. A* **62**, 023609 (2000);
R. Graham, *Journal of Mod. Opt.* **47**, 2615 (2000);
- [37] A.B. Kuklov, J.L. Birman, *Phys. Rev. A* **63**, 013609 (2001);
- [38] A. Sinatra, C. Lobo, Y. Castin, *J. Phys. B* **35**, 3599 (2002);
- [39] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77* str. 279 (2002),
lub <http://www.nrbook.com/b/bookfpdf.php>;
- [40] Y. Castin, *J. Phys. IV France* **1** (2006), również cond-mat/0407118;
- [41] Vincent Liu, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4056 (1997);
L.P. Pitaevskii, S. Stringari, *Phys. Lett. A* **235**, 398 (1997);
S. Giorgini, *Phys. Rev. A* **57**, 2949 (1998);
P. Fedichev, G. Shlyapnikov, *Phys. Rev. A* **58**, 3146 (1998);
- [42] Krzysztof A. Meissner *Klasyczna teoria pola* (WN PWN, Warszawa, 2002);
- [43] L. Salasnich, math-ph/0207030 (2002);
H.E. Haber i H.A. Weldon, *Phys. Rev. D* **25**, 502 (1982);
P. T. Landsberg, J. Dunning–Davies, *Phys. Rev.* **136**, A1049 (1965);
G. Su, J. Chen i L. Chen, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, (2006);
D.J. Toms, *Phys. Rev. D* **50**, 6457 (1994);
- [44] J. Bernstein i S. Dodelson, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 683 (1991);
- [45] H.E. Haber i H.A. Weldon, *Phys. Rev. D* **25**, 502 (1982);
- [46] H.E. Haber i H.A. Weldon, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1497 (1981);
- [47] B. Boisseau, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 7923 (2004);
- [48] R. Beckmann, F. Karsch i D.E. Miller, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1277 (1979);
- [49] H.E. Haber i H.A. Weldon, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1497 (1981);
- [50] J. D. Bjorken, S. D. Drell *Relativistic Quantum Mechanics* (McGraw-Hill Inc., 1964);
- [51] W. Greiner *Relativistic quantum mechanics* (3th Edition; Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2000);
- [52] L.D. Landau, E.M. Lifszyc, *Mechanika kwantowa: teoria relatywistyczna* (PWN, Warszawa, 1979);

- [53] H. Feshbach i F. Villars, *Rev. Mod. Phys.* **30**, no 1, 24 (1958);
- [54] Z. Idziaszek, K. Rzążewski, *Phys. Rev. A* **68**, 035604 (2003);
- [55] M. Gajda, K. Rzążewski, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2686 (1997);
M. Gajda, K. Rzążewski, *Acta Physica Polonica A* **100**, 7 (2001);