Narodowe Laboratorium Technologii Kwantowych

dr hab. Krzysztof Sacha

Opracowanie utworu pod tytułem:

"Druga kwantyzacja i metoda Bogoljubowa"

w ramach kursu zaawansowanego, organizowanego w dniach 31.08 - 25.09.09 będącego kontynuacją szkoleń z zakresu eksploatacji i zarządzania dużą infrastrukturą badawczą organizowanego przez Narodowe Laboratorium Technologii Kwantowych

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Second Quantization Formalism

In position representation N-body Hamiltonian reads

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j = 1}^{N} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j).$$

Exchange of any two particles does not change the Hamiltonian. Hence eigenstates of H, $|\psi\rangle$, can be chosen so that

$$P_{12}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle,$$

where $\lambda = +1$ (bosons) or $\lambda = -1$ (fermions).
Let us consider bosons.
For $V = 0$ the eigenstates are easy to guess

$$|\mathbf{i}_1\rangle \ |\mathbf{i}_2\rangle \ \ldots \ |\mathbf{i}_N\rangle \ ,$$

where $\mathbf{i}_1 = (i_x, i_y, i_z)_1$ are quantum numbers for the first particle.

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

In the particle representation the symmetrization is a formidable task. Let us try differently. Fock states:

$$|\mathbf{n}\rangle = |n_0, n_1, n_2, \ldots\rangle,$$

where we do not label particles – we define only how many particles occupy a given single particle state. Let us define

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j},$$

which imply

$$\begin{aligned} \hat{a}_i|\ldots, n_i, \ldots\rangle &= \sqrt{n_i}|\ldots, n_i - 1, \ldots\rangle \\ \hat{a}_i^\dagger|\ldots, n_i, \ldots\rangle &= \sqrt{n_i + 1}|\ldots, n_i + 1, \ldots\rangle. \end{aligned}$$

Then

$$\hat{H} = \sum_{i=0}^{\infty} E_i\, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i',j'} V_{i,j;i',j'}\, \hat{a}_i^\dagger\, \hat{a}_j^\dagger\, \hat{a}_{i'}\, \hat{a}_{j'},$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

where

$$V_{i,j;i',j'} = \int \mathrm{d}^3r \int \mathrm{d}^3r' \; \phi_i^*(\vec{r}) \; \phi_j^*(\vec{r}\,') \; V(\vec{r}-\vec{r}\,') \; \phi_{i'}(\vec{r}) \; \phi_{j'}(\vec{r}\,').$$

Next step

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{i=0}^{\infty} \phi_i(\vec{r}) \; \hat{a}_i,$$

that fulfil

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}\,')\right] = 0, \qquad \left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}\,')\right] = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,').$$

With the help of $\hat{\psi}(\vec{r})$ the Hamiltonian reads

$$\begin{aligned} \hat{H} \;\; = \;\; & \int \mathrm{d}^3r \; \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right] \hat{\psi}(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3r \int \mathrm{d}^3r' \; \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}\,') \; V(\vec{r}-\vec{r}\,') \; \hat{\psi}(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}\,'), \end{aligned}$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

and for $V(\vec{r}-\vec{r}\,')=g_0\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$ we obtain finally

$$\hat{H}=\int \mathrm{d}^3r\,\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})+\frac{g_0}{2}\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r})\right]\hat{\psi}(\vec{r}).$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Bogoliubov theory

Hamiltonian of N interacting particles supplemented with a constant term

$$-\mu \int \mathrm{d}^3 r \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}) = -\mu \hat{N},$$

reads

$$\hat{H} = \int \mathrm{d}^3 r \left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) H_0 \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{g_0}{2}\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}) - \mu \hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r})\right],$$

where $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})$.
Suppose the ground state is, at the first approximation, a perfect BEC

$$|N\rangle = \frac{\left(\hat{a}_0^\dagger\right)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle,$$

where $\hat{a}_0^\dagger$ creates atom in a certain (unknown) mode ϕ_0.

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Narodowe Laboratorium Technologii Kwantowych

Let us decide

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \phi_0(\vec{r})\ \hat{a}_0 + \delta\hat{\psi}(\vec{r}),$$

where

$$\delta\hat{\psi}(\vec{r}) = \hat{Q}\hat{\psi}(\vec{r}) = [1 - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|]\hat{\psi}(\vec{r}).$$

Assume

$$\left\langle \hat{a}_0^\dagger\ \hat{a}_0 \right\rangle = N_0 \simeq N.$$

that implies

$$\mathrm{d}N = \int \mathrm{d}^3 r\ \left\langle \delta\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})\ \delta\hat{\psi}(\vec{r}) \right\rangle \ll N,$$

and we can define a *small parameter*, i.e. $\mathrm{d}N/N$.
Hence, we get estimates

$$\hat{a}_0 \sim \sqrt{N}, \qquad \delta\hat{\psi} \sim \sqrt{\mathrm{d}N}.$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacjnego Innowacyjna Gospodarka

- Zero order

In zero order

$$\hat{H}^{(0)} = \int \mathrm{d}^3 r \left[\phi_0^*(\vec{r}) H_0 \phi_0(\vec{r})\ \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \frac{g_0}{2} |\phi_0(\vec{r})|^4\ \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 - \mu |\phi_0(\vec{r})|^2 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \right],$$

and we deal with a perfect BEC. One obtains an extremal value of energy

$$\langle N | \hat{H}^{(0)} | N \rangle = \int \mathrm{d}^3 r \left[\phi_0^*(\vec{r}) H_0 \phi_0(\vec{r}) N + \frac{g_0}{2} |\phi_0(\vec{r})|^4 N(N-1) - \mu |\phi_0(\vec{r})|^2 N \right],$$

if the Gross-Pitaevskii equation is fulfilled

$$H_0 \phi_0 + g_0 (N-1) |\phi_0|^2 \phi_0 = \mu \phi_0 .$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

- Second order

Operators

$$\hat{\Lambda}(\vec{r}) = \frac{\hat{a}_0^\dagger}{\sqrt{N}}\delta\psi(\vec{r}),$$

do not change particle number and they fulfil

$$\left[\hat{\Lambda}(\vec{r}_1), \hat{\Lambda}^\dagger(\vec{r}_2)\right] = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \phi_0(\vec{r}_1)\phi_0^*(\vec{r}_2) + \mathcal{O}\left(\frac{dN}{N}\right).$$

Employing $\hat{\Lambda}$ one obtains

$$\hat{H}^{(2)} = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3r\; (\hat{\Lambda}^\dagger, -\hat{\Lambda})\; \mathcal{L}\; \begin{pmatrix} \hat{\Lambda} \\ \hat{\Lambda}^\dagger \end{pmatrix},$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

where

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} H_{GP} + g_0 N \hat{Q} |\phi_0|^2 \hat{Q} & g_0 N \hat{Q} \phi_0^2 \hat{Q}^* \\ -g_0 N \hat{Q}^* \phi_0^{*2} \hat{Q} & -H_{GP}^* - g_0 N \hat{Q}^* |\phi_0|^2 \hat{Q}^* \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

Properties of $\mathcal{L}$

$$\begin{aligned} \sigma_x \, \mathcal{L} \, \sigma_x &= -\mathcal{L}^*, \\ \sigma_z \, \mathcal{L} \, \sigma_z &= \mathcal{L}^\dagger, \end{aligned}$$

where σ_x and σ_z are the Pauli matrices. These properties imply that if

$$|\psi_k^R\rangle = \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{L} \, |\psi_k^R\rangle = E_k \, |\psi_k^R\rangle,$$

and E_n is real-valued, then the left eigenvector is the following

$$|\psi_k^L\rangle \propto \sigma_z |\psi_k^R\rangle = \begin{pmatrix} u_k \\ -v_k \end{pmatrix},$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

and

$$\sigma_x|\psi_k^R\rangle^* = \begin{pmatrix} v_k^* \\ u_k^* \end{pmatrix},$$

is the right eigenvector corresponding to eigenvalue $-E_n$.
The eigenvectors of $\mathcal{L}$ can be divided into a family " $+$ " and " $-$ " according to $\langle\psi_k^R|\sigma_z|\psi_k^R\rangle = \langle u_k|u_k\rangle - \langle v_k|v_k\rangle = \pm 1$.
We can now expand the operators

$$\begin{pmatrix} \hat\Lambda(\vec r) \\ \hat\Lambda^\dagger(\vec r) \end{pmatrix} = \sum_{k\in\, "+"} \hat b_k \begin{pmatrix} u_k(\vec r) \\ v_k(\vec r) \end{pmatrix} + \hat b_k^\dagger \begin{pmatrix} v_k^*(\vec r) \\ u_k^*(\vec r) \end{pmatrix},$$

where the operators

$$\hat b_k = \int \mathrm{d}^3 r\, [u_k^*(\vec r), -v_k^*(\vec r)] \begin{bmatrix} \hat\Lambda(\vec r) \\ \hat\Lambda^\dagger(\vec r) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\langle u_k|\delta\hat\psi\rangle\, \hat a_0^\dagger - \langle v_k|\delta\hat\psi^\dagger\rangle\, \hat a_0\right],$$

fulfil bosonic commutation relations $[\hat b_k, \hat b_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}$.

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Finally we obtain

$$\hat{H} \simeq E_0(N) + \sum_{k \in "+"} E_k \, \hat{b}_k^\dagger \, \hat{b}_k .$$

Eigenstates of $\hat{H}$:

The ground state (Bogoliubov vacuum)

$$\hat{b}_k \, |0_b\rangle = 0.$$

Excited states:

$$|m_1, m_2, \ldots\rangle_b = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{\left(\hat{b}_k^\dagger\right)^{m_k}}{\sqrt{m_k!}} |0_b\rangle.$$

Condensate depletion

$$\mathrm{d}N = \int \mathrm{d}^3 r \; {}_b\langle m_1, \ldots | \hat{\Lambda}^\dagger \, \hat{\Lambda} | m_1, \ldots \rangle_b = \sum_{k=1}^{\infty} \left[m_k \langle u_k | u_k \rangle + (m_k + 1) \langle v_k | v_k \rangle \right].$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Narodowe Laboratorium Technologii Kwantowych

The Bogoliubov vacuum in the particle representation:

Suppose $|0_b\rangle \sim \left(\hat{d}^\dagger\right)^M |0\rangle$ where $[\hat{b}_k, \hat{d}^\dagger] = 0$ for all k. Then

$$\hat{b}_k \left(\hat{d}^\dagger\right)^M |0\rangle = \left(\hat{d}^\dagger\right)^M \hat{b}_k|0\rangle = 0.$$

It easy to show that

$$\hat{d}^\dagger = \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger + \sum_{k,l=1}^{\infty} Z_{kl}\ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger,$$

where $Z = U^{-1}\ V$ with $V_{kl} = \langle v_k|\phi_l\rangle$ and $U_{kl} = \langle u_k|\phi_l\rangle$. Thus the Bogoliubov vacuum in the particle representation reads

$$|0_b\rangle \sim \left(\hat{d}^\dagger\right)^{N/2} |0\rangle = \left(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k\ \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k^\dagger\right)^{N/2} |0\rangle.$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Time evolution:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\hat{\Lambda}\\ \hat{\Lambda}^{\dagger}\end{pmatrix} = \mathcal{L}\begin{pmatrix}\hat{\Lambda}\\ \hat{\Lambda}^{\dagger}\end{pmatrix}.$$

With

$$\begin{pmatrix}\hat{\Lambda}(\vec{r},t)\\ \hat{\Lambda}^{\dagger}(\vec{r},t)\end{pmatrix} = \sum_{k\in\text{"+"}} \hat{b}_k\begin{pmatrix}u_k(\vec{r},t)\\ v_k(\vec{r},t)\end{pmatrix} + \hat{b}_k^{\dagger}\begin{pmatrix}v_k^*(\vec{r},t)\\ u_k^*(\vec{r},t)\end{pmatrix},$$

we get

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}u_k(\vec{r},t)\\ v_k(\vec{r},t)\end{pmatrix} = \mathcal{L}(t)\begin{pmatrix}u_k(\vec{r},t)\\ v_k(\vec{r},t)\end{pmatrix},$$

and

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{b}_k = 0.$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Example:

Gross-Pitaevskii equation

$$-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2\phi_0}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}x^2\phi_0 + g_0 N|\phi_0|^2\phi_0 = \mu\phi_0,$$

possesses dark *soliton* solution

$$\phi_0 \simeq \sqrt{\frac{\mu_0 - x^2/2}{g_0 N}} \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right).$$

Anomalous mode: $E_1 \simeq -1/\sqrt{2}$,

$$f_+ \equiv u_1 + v_1 \simeq \frac{\sqrt{3 g_0 N}}{2\sqrt{2}\cosh^2(x/\xi)},$$

$$f_- \equiv u_1 - v_1 \simeq \sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{\mu_0 - x^2/2}{g_0 N}}.$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

For $N \simeq 1.5 \cdot 10^5$ rubidium atoms and $g_0 N = 7500$ we get

$$\mathrm{d}N = \int \mathrm{d}x \, \langle 0_b | \hat{\Lambda}^\dagger(x) \hat{\Lambda}(x) | 0_b \rangle = \int \mathrm{d}x \, |v_1(x)|^2 \simeq 60,$$

$$\rho(x) = \langle 0_b | \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) | 0_b \rangle = N |\phi_0(x)|^2 + |v_1(x)|^2,$$

and

$$|0_b\rangle \quad \sim \quad \left(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger + \lambda \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1^\dagger \right)^{N/2} |0\rangle,$$

where

$$\phi_1(x) \simeq \frac{f_+(x)}{\sqrt{\langle f_+ | f_+ \rangle}}, \qquad \lambda \simeq \frac{\langle f_+ | f_+ \rangle - \langle f_- | f_- \rangle}{\langle f_+ | f_+ \rangle + \langle f_- | f_- \rangle}.$$

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

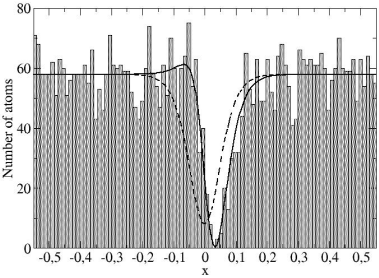

Figure: Dashed line: atomic density averaged over many experimental realizations. Histogram: example of a single measurement. Solid line: curve fitted to the histogram.

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO
Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka