

UNIwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego  
w Warszawie

Wydział Matematyczno-Przyrodniczy  
Szkoła Nauk Ścisłych

Jacek Dobrzyniecki  
Numer albumu: 82837  
Kierunek: Fizyka

**Ścisła dynamika dwóch ultrazimnych bozonów w jednowymiarowej  
podwójnej studni potencjału**

Praca magisterska  
Promotor:  
dr hab. Tomasz Sowiński

Warszawa 2016

.....  
*Imię i nazwisko studenta/studentki*

.....  
*Nr albumu*

.....  
*Wydział*

.....  
*Institut*

.....  
*Kierunek*

**Dziekan Wydziału** .....

.....

### OŚWIADCZENIE

Świadomy(a) odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

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

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

Oświadczam, że poinformowano mnie o zasadach dotyczących kontroli samodzielności prac dyplomowych i zaliczeniowych. W związku z powyższym oświadczam, że wyrażam zgodę na przetwarzanie\* moich prac pisemnych (w tym prac zaliczeniowych i pracy dyplomowej) powstałych w toku studiów i związanych z realizacją programu kształcenia w Uczelni, a także na przechowywanie pracy dyplomowej w celach realizowanej procedury antyplagiatowej w ogólnopolskim repozytorium pisemnych prac dyplomowych.

.....  
*podpis studenta*

\*Przez przetwarzanie pracy rozumie się porównywanie przez system antyplagiatowy jej treści z innymi dokumentami (w celu ustalenia istnienia nieuprawnionych zapożyczeń) oraz generowanie raportu podobieństwa.

### OŚWIADCZENIE

Oświadczam, że niniejsza praca napisana przez

Pana/Panią....., nr albumu ..... została przygotowana pod moim kierunkiem i stwierdzam, że spełnia ona warunki do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

.....  
*podpis promotora*

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Wprowadzenie</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Stany jednocząstkowe w podwójnej studni</b>	<b>7</b>
2.1	Potencjał podwójnej studni . . . . .	7
2.2	Numeryczne rozwiązanie równania Schrödingera . . . . .	8
2.3	Widmo hamiltonianu . . . . .	10
2.4	Baza „lewo-prawo” . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Hamiltonian układu dwucząstkowego</b>	<b>15</b>
3.1	Hamiltonian dwóch bozonów oddziałujących potencjałem kontaktowym	15
3.2	Hamiltonian w języku drugiej kwantyzacji . . . . .	16
3.3	Modele uproszczone . . . . .	17
3.3.1	Model dwumodowy . . . . .	17
3.3.2	Model dwumodowy uproszczony . . . . .	18
3.4	Czasowe równanie Schrödingera dla dwóch bozonów . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Parametry charakteryzujące stan układu</b>	<b>22</b>
4.1	Populacja studni . . . . .	22
4.2	Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach . . .	23
4.3	Widmo jednocząstkowej macierzy gęstości . . . . .	24
<b>5</b>	<b>Dynamika układu</b>	<b>26</b>
5.1	Bozony początkowo w tej samej studni . . . . .	26
5.1.1	Populacja prawej studni . . . . .	26
5.1.2	Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach . . . . .	27
5.1.3	Charakterystyka widma jednocząstkowej macierzy gęstości . . . . .	29
5.2	Bozony początkowo w przeciwnych studniach . . . . .	29
5.2.1	Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach . . . . .	30
5.2.2	Charakterystyka widma jednocząstkowej macierzy gęstości . . . . .	31
<b>6</b>	<b>Wnioski i zakończenie</b>	<b>33</b>
<b>7</b>	<b>Literatura</b>	<b>35</b>



# Rozdział 1

## Wprowadzenie

Dziedzina badań nad układami ultrazimnych gazów, od czasu eksperymentalnego wytworzenia kondensatu Bosego-Einsteina w 1995 roku, stanowi jeden z najprężniej rozwijających się działów fizyki. Duży udział miało w tym opracowanie nowych metod doświadczalnych, takich jak nadzwyczaj skuteczne techniki chłodzenia umożliwiające uzyskanie temperatur rzędu nanokelwinów, lub zaawansowane metody pułapkowania pozwalające na precyzyjną kontrolę kształtu potencjału pułapkującego. Ważną rolę odegrała także technika rezonansów Feschbacha, pozwalająca na sterowanie siłą oddziaływań międzyatomowych. Dzięki tym technikom zaczęła rozwijać się dziedzina ultrazimnych układów silnie skorelowanych, tj. takich, w których siły oddziaływań są na tyle duże, by odgrywać istotną rolę w dynamice i wywołać korelacje między obserwabkami charakteryzującymi poszczególne cząstki. Układy takie mają potencjalne zastosowanie w komputerach kwantowych, a także w kwantowej symulacji różnych zagadnień z dziedziny fizyki materii skondensowanej [2, 3].

Jednym z częściej badanych zagadnień jest dynamika układu ultrazimnych cząstek w podwójnej studni potencjału [4–14]. Układ taki daje możliwość zaobserwowania analogów intrygujących zjawisk kwantowych, takich jak tunelowanie elektronów poprzez złącze p-n [15] bądź efekt Josephsona [16]. Dla dużych układów ściśle rozwiązanie numeryczne jest nieosiągalne w praktyce ze względu na nadzwyczaj wysoką złożoność obliczeniową problemu [3]. Dlatego do analizy numerycznej takich układów stosuje się z reguły rozmaite modele uproszczone. Ponieważ dzisiejsze techniki doświadczalne pozwalają bardzo precyzyjnie sterować parametrami badanego układu, takimi jak stan początkowy układu, głębokość studni potencjału, czy siła oddziaływań, pole badań mogących znaleźć praktyczne zastosowania rozszerza się o coraz więcej zagadnień, pozostających dotąd w sferze czysto teoretycznej. Tym samym coraz istotniejsza staje się odpowiedź na pytanie, w jakim zakresie różnego rodzaju modele uproszczone nadają się do badania układów w różnych reżimach.

Do analizy zachowania układu bozonów w podwójnej studni stosuje się z reguły model dwumodowy, w którym zakłada się, że funkcja falowa układu jest pewną superpozycją tylko dwóch modów, opisujących cząstki znajdujące się w jednej bądź drugiej studni. Ponadto uwzględnia się jedynie zjawiska tunelowania pojedynczych cząstek między studniami oraz lokalne oddziaływania dwóch cząstek w tej samej studni. Po zastosowaniu takiego modelu dynamikę układu wyznacza się w przybliżeniu pola średniego poprzez rozwiązanie równania Grossa-Pitajewskiego [17–19]. W niektórych przypadkach stosuje się pełniejsze odmiany modelu dwumodowego, gdzie hamiltonian wzbogacony jest o dodatkowe człony, uwzględniające długozasięgowe oddziaływania pomiędzy cząstkami oraz tunelowanie indukowane oddziaływaniami [20–22].

Poprawność tych modeli uproszczonych została potwierdzona eksperymentalnie dla układów atomów słabo oddziałujących. Jednak w przypadku, gdy oddziaływania między cząstkami są silne, modele dwumodowe okazują się niewystarczające. Wynika to z faktu, że pod wpływem oddziaływań w układzie pojawiają się korelacje międzycząstkowe i w rezultacie nie da się już opisać cząstek w jednej studni pojedynczym stanem kwantowym [23]. Mimo to w niektórych pracach stosuje się model dwumodowy do opisu układów silnie skorelowanych [24], co jest potencjalnie ryzykowne wobec słabości tego modelu.

Głównym celem mojej pracy jest weryfikacja zakresu stosowalności modeli dwumodowych w zależności od warunków eksperymentalnych. W tym celu opracowałem numeryczną symulację układu  $N = 2$  bozonów w potencjale podwójnej studni. Jest to najprostszy układ, który daje możliwość zaobserwowania wpływu oddziaływań międzycząstkowych na dynamikę. Prostota tego układu minimalizuje złożoność wymaganych obliczeń, umożliwiając posłużenie się ścisłym modelem numerycznym, który uwzględnia dużą liczbę stanów wzbudzonych. Obliczona w ten sposób dynamika porównywana jest z wynikami dla modeli dwumodowych, które zakładają, że baza stanów jednocząstkowych ograniczona jest do dwóch stanów, opisujących bozony zlokalizowane w lewej bądź prawej studni. W pracy rozważam dwa modele dwumodowe: najprostszy, uwzględniający tylko tunelowanie pojedynczych cząstek i oddziaływania cząstek w tej samej studni, oraz model rozszerzony, opisujący większą liczbę procesów. Obliczenia powtórzone zostały dla różnych zestawów parametrów doświadczalnych (dla różnej siły oddziaływań, głębokości studni oraz warunków początkowych), po czym wyniki uzyskane za pomocą modeli uproszczonych zostały porównane ze ścisłą dynamiką w celu weryfikacji ich poprawności.

Początkową część pracy stanowi omówienie teoretycznej części zagadnienia oraz wyjaśnienie zastosowanych modeli fizycznych i metod matematycznych. W rozdziale 2. omówione zostają kwestie dotyczące potencjału podwójnej studni i stanów własnych pojedynczej cząstki w tym potencjale. Rozdział 3. opisuje badany układ dwóch bozonów oraz jego hamiltonian w modelu pełnym i modelach przybliżonych. W rozdziale 4. przedstawiamy parametry charakteryzujące stan układu, które dają wgląd w jego zachowanie i pozwalają na porównanie modelu pełnego z modelami uproszczonymi. Rozdział 5. prezentuje wyniki obliczeń dla różnych parametrów i warunków początkowych. Rozdział 6. stanowi podsumowanie.

Fragmenty poniższej pracy stały się podstawą artykułu: J. Dobrzyniecki, T. Sowiński: „*Exact dynamics of two ultra-cold bosons confined in a one-dimensional double-well potential*” EPJ D **70**, 83 (2016), powstałego w ramach grantu Iuventus Plus finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wzwyższego nr 0440/IP3/2015/73.

## Podziękowania

Serdecznie dziękuję dr. hab. Tomaszowi Sowińskiemu za wielką pomoc, cierpliwość, i wyjaśnienie wszelkich niejasnych dla mnie kwestii.

## Rozdział 2

# Stany jednocząstkowe w podwójnej studni

Na początku omówimy wykorzystany w niniejszej pracy potencjał podwójnej studni. Poniższy rozdział zawiera wstępne przedstawienie kształtu potencjału oraz parametru  $b$ , sterującego głębokością studni. Następnie prezentujemy rozwiązanie równania Schrödingera dla jednej cząstki w tym potencjale oraz własności stanów i energii własnych cząstki w zależności od  $b$ . Ponadto wprowadzamy bazę stanów „lewo-prawo”, lokalizującą cząstkę w jednej bądź drugiej studni.

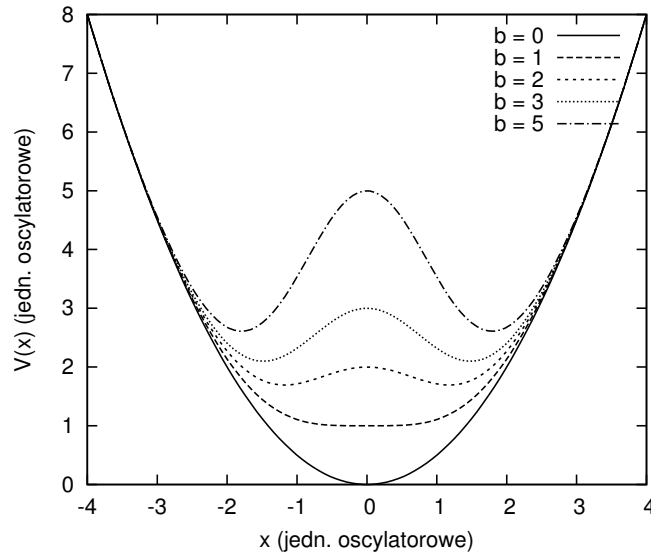
### 2.1 Potencjał podwójnej studni

Potencjał podwójnej studni jest w gruncie rzeczy uproszczoną, ograniczoną odmianą jednowymiarowego potencjału okresowego, który wytworzyć można na różne sposoby. Klasyczną metodą jest użycie sieci optycznej – elektromagnetycznej fali stojącej, stworzonej przez interferujące wiązki lasera, gdzie zmienne w przestrzeni pole elektryczne powoduje przesunięcie poziomów energetycznych cząstek (efekt Starka). Dzięki temu zjawisku sieć optyczna stanowi dla cząstek okresowy w przestrzeni potencjał, mający postać serii studni. Głębokość i wzajemną odległość tych studni można wedle potrzeby dopasowywać, regulując odpowiednio moc i długość fali wiązek laserowych. Jeśli ograniczamy się do uwzględnienia jedynie dwóch sąsiadujących węzłów sieci, otrzymamy właśnie podwójną studnię potencjału.

Kształt podwójnej studni, czyli dwóch minimów rozdzielonych barierą można modelować matematycznie na szereg sposobów [25]. Na potrzeby tej pracy wybieramy jeden z nich, tj. złożenie potencjału oscylatora harmonicznego z dzielącą go na dwie połowy barierą gaussowską:

$$V(x) = \hbar\omega \left[ \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + b e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \right]. \quad (2.1)$$

Bezwymiarowy parametr  $b$  określa wysokość bariery. Kształt potencjału dla różnych wartości tego parametru ukazany jest na rys. 2.1. Widać, że parametr  $b$  jest zarazem powiązany z głębokością studni – im bariera wyższa, tym głębsze są studnie. Dla  $b > 1$  potencjał ma maksimum w punkcie  $x = 0$  (stanowiące szczyt bariery potencjału) i dwa minima w punktach  $x = \pm \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \ln b$  (dna studni). Studnie określać będziemy jako „lewa” ( $x < 0$ ) i „prawa” ( $x > 0$ ).



**Rysunek 2.1:** Potencjał  $V(x)$  dla różnych wartości  $b$ . Wysokość środkowej bariery, a więc i głębokość studni, wzrasta w miarę zwiększania tego parametru.

Dla uproszczenia w dalszych rozważaniach przyjmijmy jednostki oscylatora harmonicznego: odległość mierzona jest w jednostkach  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , energia w jednostkach  $\hbar\omega$ . Hamiltonian dla pojedynczej cząstki w potencjale (2.1) ma w tych jednostkach następującą postać:

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + b e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (2.2)$$

Równanie Schrödingera dla tego hamiltonianu

$$H_0 \Phi_n(x) = \mathcal{E}_n \Phi_n(x) \quad (2.3)$$

ma dobrze znane rozwiązanie dla  $b = 0$ , gdyż wówczas potencjał sprowadza się do potencjału oscylatora harmonicznego. Dla  $b > 0$  musimy posłużyć się rozwiązaniem numerycznym. Wykorzystana przez nas metoda zostanie szczegółowo opisana w następnym podrozdziale.

## 2.2 Numeryczne rozwiązanie równania Schrödingera

Rozwiązanie numeryczne polega na przedstawieniu hamiltonianu (2.2) w postaci skończonej macierzy i zdiagnozowaniu jej. W wyniku tej operacji otrzymujemy energie (wartości własne) i funkcje falowe (wektory własne).

Zaczynamy od tego, że w miejsce nieskończonej, ciągłej dziedziny  $x \in (-\infty, +\infty)$  przyjmujemy ograniczony odcinek  $x \in (-L, +L)$  podzielony na  $\mathcal{N}$  punktów w równych odstępach  $\Delta = \frac{2L}{\mathcal{N}}$ . Kolejne punkty oznaczamy jako  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{\mathcal{N}}$ . Wszelkie funkcje typu  $f(x)$  można wyrazić w przybliżonej postaci jako wektor  $\mathcal{N}$ -wymiarowy o kolejnych składowych  $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_{\mathcal{N}})$ . Na potrzeby pracy dobraliśmy parametry  $L = 24$  (w przyjętych jednostkach oscylatorowych) i  $\mathcal{N} = 2048$ , skąd wynika  $\Delta \approx 0,023$ .



Potencjał  $V(x)$  wyrażamy w postaci diagonalnej macierzy o wymiarach  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$  i kolejnych elementach na diagonalu równych  $V(x_1), V(x_2), \dots, V(x_{\mathcal{N}})$ . Podobnie można wyrazić w postaci macierzowej wyraz energii kinetycznej  $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$ . Zauważmy najpierw, że pochodną można w przybliżeniu obliczyć z różnicy sąsiadujących wyrazów:  $f'(x_i) = \frac{1}{\Delta}[f(x_{i+1}) - f(x_i)]$  bądź też  $f'(x_i) = \frac{1}{\Delta}[f(x_i) - f(x_{i-1})]$ . Wówczas

$$\begin{aligned} f''(x_i) &= \frac{1}{\Delta}[f'(x_{i+1}) - f'(x_i)] \\ &= \frac{1}{\Delta^2}[\{f(x_{i+1}) - f(x_i)\} - \{f(x_i) - f(x_{i-1})\}] \\ &= \frac{1}{\Delta^2}[f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

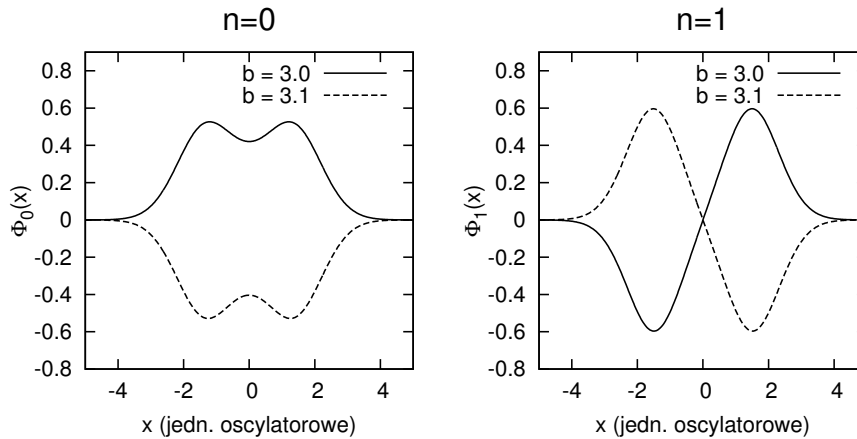
Tłumacząc wynik równania (2.4) na postać macierzową i mnożąc przez  $-\frac{1}{2}$ , otrzymujemy symetryczną macierz trójpasmową, gdzie diagonalne elementy równe są  $\frac{1}{\Delta^2}$ , a z każdym z nich (z lewej i prawej strony) sąsiaduje element równy  $-\frac{1}{2\Delta^2}$ .

Dodając do siebie macierzowe reprezentacje potencjału i energii kinetycznej, otrzymujemy hamiltonian (2.2) w postaci trójpaszowej, symetrycznej macierzy. Równanie Schrödingera (2.3) przybiera wówczas postać:

$$\begin{bmatrix} V(x_1) + \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2\Delta^2} & V(x_2) + \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{1}{2\Delta^2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2\Delta^2} & V(x_3) + \frac{1}{\Delta^2} & -\frac{1}{2\Delta^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\Delta^2} & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_n(x_1) \\ \Phi_n(x_2) \\ \Phi_n(x_3) \\ \Phi_n(x_4) \\ \vdots \end{bmatrix} = \mathcal{E}_n \begin{bmatrix} \Phi_n(x_1) \\ \Phi_n(x_2) \\ \Phi_n(x_3) \\ \Phi_n(x_4) \\ \vdots \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Do zdiagonalizowania tej macierzy wykorzystujemy procedurę `DSTEV` stanowiącą część biblioteki `LAPACK` dla języka Fortran i przeznaczoną specjalnie do diagonalizacji macierzy trójpaszowych. W wyniku zastosowania tej procedury otrzymujemy  $\mathcal{N}$  wartości własnych  $\mathcal{E}_n$  (gdzie liczba kwantowa  $n = 0, 1, 2, \dots$ ) i odpowiadające im stany własne  $\Phi_n(x)$ . W praktyce w naszym modelu nie będziemy potrzebować wszystkich  $\mathcal{N}$  stanów własnych. Dla wygody i przyspieszenia obliczeń w naszych obliczeniach uwzględniamy  $n$  nie większe od pewnej określonej granicy, np.  $n_{max} = 30$ . Ten model, w którym uwzględniamy 31 pierwszych stanów własnych, nazywać będziemy dalej *modelem pełnym*, w odróżnieniu od modeli dwumodowych, gdzie  $n_{max} = 1$ .

Funkcje falowe stanów własnych  $\Phi_n(x)$  otrzymujemy w postaci wektorów, jak pokazano z prawej strony równania (2.5). Wektory własne znane są z dokładnością do fazy, ponieważ wektory otrzymane za pomocą procedury `DSTEV` mają składowe rzeczywiste. Zachodzi jeszcze konieczność weryfikacji znaku funkcji własnych. Obliczone przez `DSTEV` stany własne są wprawdzie automatycznie unormowane do 1, ale występuje niepewność co do znaku funkcji falowych. Stany  $\Phi_n(x)$  i  $-\Phi_n(x)$  są bowiem równoprawnymi stanami własnymi odpowiadającymi danej energii. Procedura `DSTEV` może z równym powodzeniem dać jeden, jak i drugi wynik, w zależności od parametru  $b$ . Drobne zmiany  $b$  mogą powodować nagłą zmianę znaku funkcji (patrz rys. 2.2). W naszej pracy przyjęliśmy konwencję, w myśl której znak funkcji falowej tak jest dobrany, aby dla  $x \rightarrow \infty$  (w tym obszarze funkcja zaczyna dążyć asymptotycznie do zera) przybierała ona zawsze wartości dodatnie. Taką konwencję stosuje się bowiem powszechnie w literaturze dla funkcji falowych oscylatora harmonicznego. W



**Rysunek 2.2:** Stany własne dla  $n = 0$  i  $n = 1$  wyznaczone za pomocą procedury DSTEVE dla dwóch różnych wartości parametru  $b$ . Widać, że znak funkcji zmienia się w zależności od  $b$ . Świadczy to o konieczności implementacji procedury standaryzującej znak funkcji.

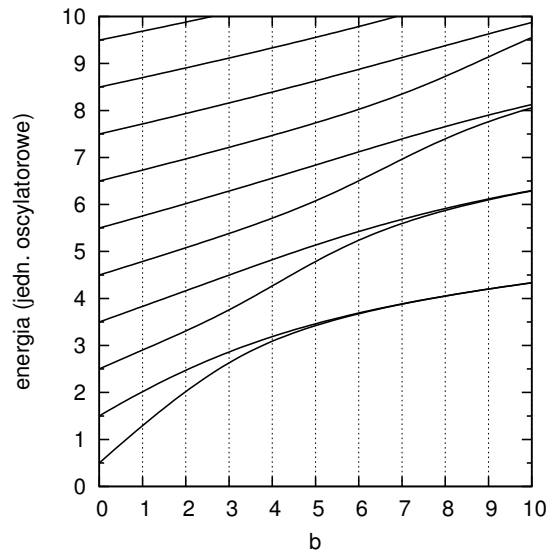
naszym programie została zatem zaimplementowana dodatkowa procedura, dbająca o poprawność znaku.

Warto zauważyć, że procedura DSTEVE wymaga dodatkowej ostrożności przy diagonalizacji hamiltonianów o zdegenerowanych energiach. Jeśli jednej energii odpowiada wiele możliwych funkcji własnych, wówczas DSTEVE może w wyniku dać dowolną kombinację liniową tych funkcji. Kwestia ta nie ma jednak znaczenia w przypadku jednowymiarowym, w którym degeneracja energii w widmie dyskretnym nie jest możliwa [26].

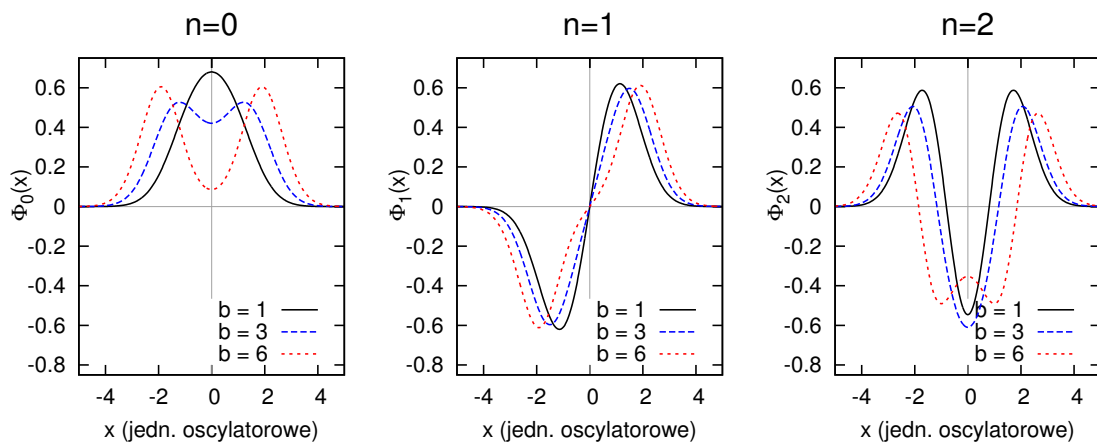
## 2.3 Widmo hamiltonianu

Zbiór energii własnych hamiltonianu (2.2) i odpowiadające im stany przedstawiają rysunki 2.3 i 2.4. Dla  $b = 0$  otrzymujemy oczywiście dobrze znane stany własne oscylatora harmonicznego i ich energie  $\mathcal{E}_n = n + \frac{1}{2}$ . Wyższe wartości  $b$  powodują coraz wyraźniejsze przejawianie się wpływu centralnej bariery.

Energie własne rosną wraz ze wzrostem bariery w wyniku coraz wyższego położenia den studni (patrz rys. 2.1). Oprócz tego jednak obserwujemy zbliżanie się do siebie par energii własnych odpowiadających parom stanów symetrycznych i antysymetrycznych ( $n = 0$  i  $1$ ,  $2$  i  $3$ , itd.). Różnica energii każdej pary dąży do zera wraz ze wzrostem  $b$  i można mówić o pojawiającej się degeneracji energii własnych w granicy  $b \rightarrow \infty$ . Efekt ten zachodzi coraz później dla energii o wyższych  $n$ . Wzrost bariery wywiera wyraźny wpływ na kształt funkcji falowych i zgodnie z intuicją powoduje coraz większe zbliżanie się do zera wartości funkcji falowej w okolicach środka układu (efekt ten jest szczególnie widoczny dla funkcji symetrycznych). Zarazem wzrasta prawdopodobieństwo znalezienia cząstki dla coraz odleglejszych od  $x = 0$  obszarów. Wynika to z kolei z widocznego na rys. 2.1 przesuwania się den obu studni. Dodatkowo można zaobserwować, że w granicy dużych  $b$  funkcje obu stanów w każdej parze są równe co do modułu, lecz mają przeciwną symetrię (patrz rys. 2.5). Wynika to z faktu, że w miarę, jak rośnie bariera, kształt potencjału zmierza do postaci dwóch całkowicie oddzielnych, identycznych studni. Funkcja falowa dla lewego obszaru ( $x < 0$ )



**Rysunek 2.3:** Energie własne hamiltonianu dla wzrastających wartości parametru  $b$ .



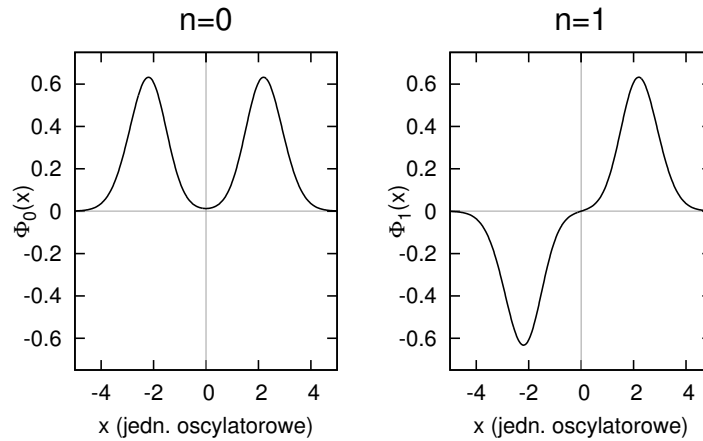
**Rysunek 2.4:** Stany własne dla  $n = 0, 1, 2$  z różnymi parametrami  $b$ .

jest w granicy dużych  $b$  równa (co do modułu) funkcji w obszarze prawym ( $x > 0$ ). Funkcje w obu tych obszarach mogą mieć ten sam znak bądź przeciwny. Dlatego całkowita funkcja falowa  $\Phi_n(x)$ , stanowiąca zszycie funkcji falowych dla obszaru lewego i prawego, może być symetryczna bądź antysymetryczna. Ponieważ zarówno funkcja symetryczna, jak i antysymetryczna są równe co do modułu, wykazują one degenerację ich energii własnych.

## 2.4 Baza „lewo-prawo”

Dla wygodniejszego zobrazowania dynamiki cząstek w dalszej części pracy posługiwać się będziemy alternatywną bazą stanów jednociąłowych, którą nazwiemy bazą „lewo-prawo”. Każdy stan „lewo-prawo” ma profil gęstości zlokalizowany w lewej bądź prawej studni.

Stany „lewo-prawo” oznaczymy symbolem  $\varphi_{\sigma i}$ , gdzie  $\sigma \in \{L, R\}$  oznacza odpo-



**Rysunek 2.5:** Dwie pierwsze funkcje falowe stanów własnych podwójnej studni, przy bardzo wysokiej barierze  $b = 10$ . Można zauważyć, że funkcje mają praktycznie tę samą wartość bezwzględną, lecz przeciwną symetrię. Widać też, że każda z funkcji przypomina parę zszytych ze sobą kopii funkcji stanu podstawowego oscylatora harmonicznego.

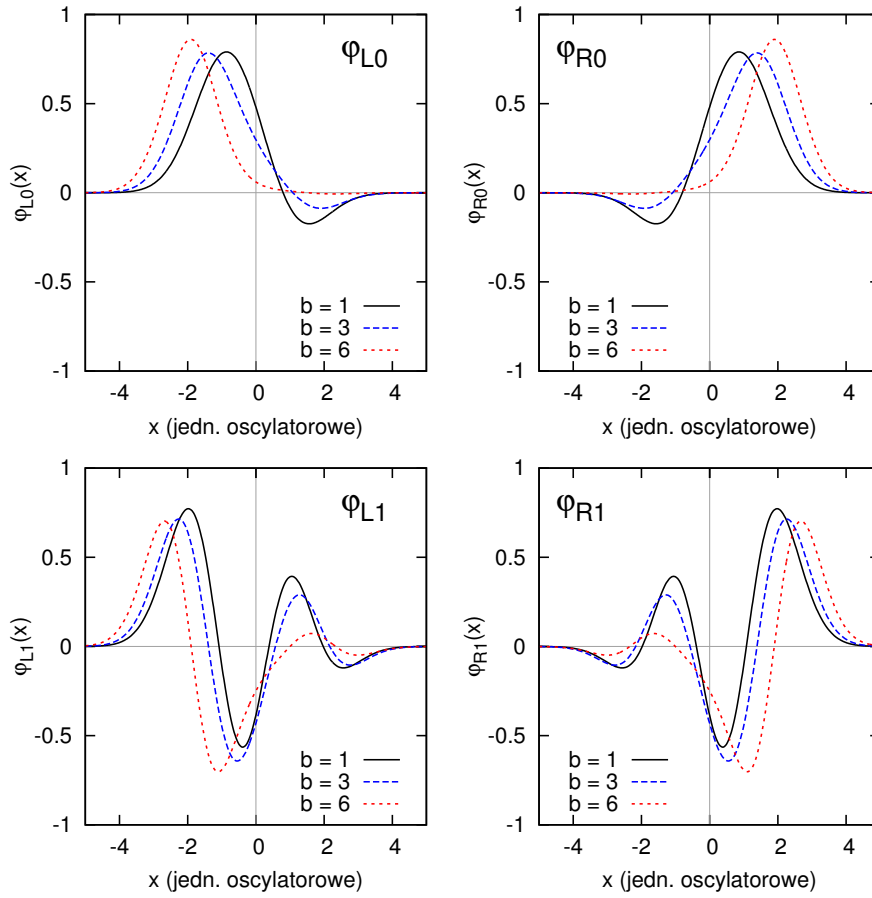
wiednio lewą bądź prawą studnię, a indeks  $i = 0, 1, 2, \dots$  numeruje coraz wyższe stany wzbudzone cząstki. Każdy stan „lewo-prawo” stanowi kombinację liniową parzystego i nieparzystego stanu własnego podwójnej studni:

$$\begin{aligned}\varphi_{Ri}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{2i}(x) + \Phi_{2i+1}(x)), \\ \varphi_{Li}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{2i}(x) - \Phi_{2i+1}(x)).\end{aligned}\quad (2.6)$$

Zauważmy, że stany „lewo-prawo” o tym samym indeksie stanowią swoje odbicia lustrzane względem  $x = 0$ , tj.  $\varphi_{Li}(x) = \varphi_{Ri}(-x)$ . Wynika to z faktu, że stany własne  $\Phi$  są funkcjami parzystymi i nieparzystymi dla, odpowiednio, parzystych i nieparzystych indeksów.

Rys. 2.6 przedstawia funkcje falowe stanów o indeksach  $i = 0, i = 1$  dla różnych wartości parametru  $b$ . Dla niskich  $b$  lokalizacja cząstki (w lewej bądź prawej studni) nie jest dokładnie określona, ponieważ funkcje falowe  $\varphi_{Li}$  i  $\varphi_{Ri}$  częściowo nakładają się na siebie w okolicach  $x = 0$ . Oznacza to, że nawet cząstka znajdująca się teoretycznie w jednej ze studni może zostać odnaleziona w obszarze odpowiadającym drugiej, zwłaszcza jeśli cząstka znajduje się w stanie wzbudzonym (wyższe wartości indeksu  $i$ ). Wzrost bariery oddzielającej obie studnie coraz wyraźniej ogranicza funkcje falowe stanów „lewo-prawo” do lewego bądź prawego obszaru. W granicy dużych  $b$  funkcje „lewo-prawo” przybierają kształty, zbliżone do funkcji oscylatora harmonicznego (przesuniętych w prawo bądź w lewo).

Stany  $\varphi_{\sigma i}$  stanowią poprawną, ortonormalną bazę. Można łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, że  $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\sigma i}^*(x) \varphi_{\sigma' j}(x) dx = \delta_{\sigma \sigma'} \delta_{ij}$ . Nie są to jednak stany własne hamiltonianu (2.2). Jeśli hamiltonian wyrażony jest w postaci macierzowej w bazie „lewo-prawo”, wówczas jego elementy macierzowe, sprzęgające dwa stany zlokalizo-



**Rysunek 2.6:** Funkcje falowe dwóch stanów podstawowych ( $i = 0$ ) i dwóch najniższych stanów wzbudzonych ( $i = 1$ ) bazy „lewo-prawo” dla różnych wysokości bariery  $b$ .

wane w tej samej studni, równe są:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\sigma i}^*(x) H_0 \varphi_{\sigma j}(x) dx &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi_{2i}^*(x) \pm \Phi_{2i+1}^*(x)] H_0 [\Phi_{2j}(x) \pm \Phi_{2j+1}(x)] dx \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi_{2i}^*(x) \pm \Phi_{2i+1}^*(x)] [\mathcal{E}_{2j} \Phi_{2j}(x) \pm \mathcal{E}_{2j+1} \Phi_{2j+1}(x)] dx \\
 &= \frac{1}{2} [\mathcal{E}_{2i} + \mathcal{E}_{2i+1}] \delta_{ij} = E_i \delta_{ij}
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

niezależnie od indeksu  $\sigma$ . Oprócz tego w hamiltonianie obecne są elementy poza-diagonalne, które sprzęgają ze sobą stany o tym samym poziomie wzbudzenia, ale

zlokalizowane w przeciwnych studniach:

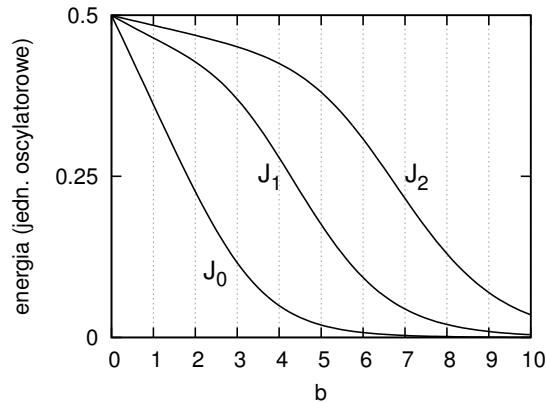
$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{L_i}^*(x) H_0 \varphi_{R_j}(x) dx &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi_{2i}^*(x) - \Phi_{2i+1}^*(x)] H_0 [\Phi_{2j}(x) + \Phi_{2j+1}(x)] dx \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi_{2i}^*(x) - \Phi_{2i+1}^*(x)] [\mathcal{E}_{2j} \Phi_{2j}(x) + \mathcal{E}_{2j+1} \Phi_{2j+1}(x)] dx \\
 &= \frac{1}{2} [\mathcal{E}_{2i} - \mathcal{E}_{2i+1}] \delta_{ij} = -J_i \delta_{ij}.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Jak widać, hamiltonian jednocząstkowy nie sprzęga zaś ze sobą stanów o różnych poziomach wzbudzenia.

W równaniach (2.7) i (2.8) wprowadziliśmy oznaczenia

$$\begin{aligned}
 E_i &= \frac{\mathcal{E}_{2i+1} + \mathcal{E}_{2i}}{2}, \\
 J_i &= \frac{\mathcal{E}_{2i+1} - \mathcal{E}_{2i}}{2}.
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Parametry  $J_i$  mają interpretację tunelowania, tzn. kontrolują proces przechodzenia („tunelowania”) cząstek z jednej studni do drugiej. Jak widać na rys. 2.7, amplitudy tunelowania  $J_i$  maleją do zera w granicy dużych  $b$ .



**Rysunek 2.7:** Amplitudy tunelowania  $J_i$  dla  $i = 0, 1, 2$  w zależności od wysokości bariery  $b$ .

## Rozdział 3

# Hamiltonian układu dwucząstkowego

W tym rozdziale przyjrzymy się głównemu przedmiotowi badań pracy, czyli układowi dwóch oddziałujących ze sobą bozonów w potencjale podwójnej studni. Na początku opiszemy, jak wygląda jego hamiltonian, wyjaśniając przy tej okazji właściwości międzyatomowego oddziaływania kontaktowego. Aby móc rozwiązać równanie Schrödingera dla układu dwóch cząstek, przyjmujemy formalizm drugiej kwantyzacji i wyrażamy hamiltonian w języku tej konwencji. Następnie opisujemy badane w tej pracy uproszczone modele dwumodowe i ich hamiltoniany. Na końcu opisane jest numeryczne rozwiązanie równań Schrödingera dla poszczególnych hamiltonianów.

### 3.1 Hamiltonian dwóch bozonów oddziałujących potencjałem kontaktowym

W układach ultrazimnych gazów oddziaływania międzyatomowe są dość proste do opisania. Zakładając, że w temperaturze bliskiej 0 K długość fali materii cząstek jest znacznie większa niż zasięg oddziaływań, możemy zaniedbać szczegóły zależności oddziaływań od struktury funkcji falowych i odległości cząstek. Wtedy potencjał oddziaływań międzyatomowych przybliżamy funkcją delta

$$V_{int} = g\delta(x_1 - x_2), \quad (3.1)$$

gdzie  $x_1$  i  $x_2$  oznaczają pozycje obu bozonów, zaś  $g$  określa siłę oddziaływań (dla  $g > 0$  oddziaływania są odpychające). Parametr  $g$ , zależny od długości rozpraszania cząstek [23], można regulować doświadczalnie za pomocą metody zwanej rezonansem Feschbacha. W metodzie tej wykorzystuje się zewnętrzne pole magnetyczne, by wpłynąć na strukturę subtelną poziomów energetycznych układu i zwiększyć prawdopodobieństwo wzajemnego rozpraszania cząstek [27].

Hamiltonian dwóch oddziałujących bozonów jest oczywiście sumą członów jednocząstkowych (2.2) dla obydwu bozonów, oraz członu oddziaływań z wyrażenia (3.1):

$$H = H_0 + V_{int} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) + b \left( e^{-\frac{x_1^2}{2}} + e^{-\frac{x_2^2}{2}} \right) + g\delta(x_1 - x_2). \quad (3.2)$$

Równanie Schrödingera dla tego hamiltonianu ma postać

$$H|\mathbf{v}_i\rangle = \lambda_i|\mathbf{v}_i\rangle, \quad (3.3)$$

gdzie  $|v_i\rangle$  to oznaczenie dwucząstkowego stanu własnego.

Rozwiązanie równania (3.3) jest dość skomplikowane. Jedynie dla potencjału oscylatora harmonicznego (przypadek  $b = 0$ ) znane jest rozwiązanie analityczne [28]. Jednak po uwzględnieniu gaussowskiej bariery równanie staje się znacznie bardziej kłopotliwe. Dla  $b > 0$  musimy się zatem uciec do metod numerycznych. By ułatwić nam to zadanie, a także uprościć opis stanu układu i jego dynamiki, w dalszej części pracy przejdziemy do konwencji drugiej kwantyzacji – formalizmu, który znacznie ułatwia opisywanie kwantowych stanów wielocząstkowych z nierozróżnialnymi cząstkami.

## 3.2 Hamiltonian w języku drugiej kwantyzacji

Przy standardowym sposobie opisu cząstek pytamy, w jakim stanie jest każda poszczególna cząstka. Formalizm drugiej kwantyzacji każe nam spojrzeć na zagadnienie z przeciwnej strony. W tym formalizmie pytamy o to, iloma cząstkami obsadzony jest każdy poszczególny stan. Śledzenie ewolucji układu sprowadza się wówczas do śledzenia zmian liczby obsadzeń poszczególnych stanów. Formalizm ten umożliwia z równą łatwością opisywanie układów o dowolnej liczbie cząstek.

W języku drugiej kwantyzacji kluczową rolę pełni operator pola  $\hat{\psi}(x)$ , który anihiluje cząstkę na pozycji  $x$ , oraz sprzężony do niego operator  $\hat{\psi}^\dagger(x)$  tworzący cząstkę na pozycji  $x$ . W rozważanym przypadku operatory te spełniają bozonowe relacje komutacyjne:  $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] = \delta(x - x')$  oraz  $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] = 0$ .

Hamiltonian (3.2), zapisany w języku drugiej kwantyzacji za pomocą tych operatorów, przybiera postać:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) H_0 \hat{\psi}(x) dx + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') V_{int} \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x') dx dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) H_0 \hat{\psi}(x) dx + \frac{g}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x) dx. \end{aligned} \quad (3.4)$$

W tym miejscu należy podkreślić, że hamiltonian (3.2) oraz równanie Schrödingera (3.3) nie zawiera informacji o kwantowej statystyce. To oznacza, że należy dodatkowo zapewnić odpowiednią symetryzację stanów dwucząstkowych ze względu na zamianę cząstek. Problem ten jest automatycznie rozwiązany w formalizmie drugiej kwantyzacji dzięki odpowiedniemu wyborowi relacji komutacyjnych dla operatorów pola. Hamiltonian (3.4) jest ogólniejszy niż (3.2), ponieważ jest niezależny od liczby cząstek w układzie. Operatory pola, wyrażone w bazie położeniowej, można rozwinąć w bazie dowolnych stanów jednocząstkowych. Wykorzystując bazę „lewo-prawo” otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_{\sigma,i} \hat{a}_{\sigma i} \varphi_{\sigma i}(x), \\ \hat{\psi}^\dagger(x) &= \sum_{\sigma,i} \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \varphi_{\sigma i}^*(x), \end{aligned} \quad (3.5)$$

gdzie operator  $\hat{a}_{\sigma i}$  anihiluje bozon w studni  $\sigma$  na poziomie wzbudzenia  $i$ , tj. bozon w stanie jednocząstkowym opisanym funkcją falową  $\varphi_{\sigma i}(x)$ . Operatory anihilacji  $\hat{a}_{\sigma i}$  i sprzężone z nimi operatory kreacji  $\hat{a}_{\sigma i}^\dagger$  spełniają w omawianym przypadku bozonowe



reguły komutacyjne:  $[\hat{a}_{\sigma i}, \hat{a}_{\sigma' j}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ij}$  oraz  $[\hat{a}_{\sigma i}, \hat{a}_{\sigma' j}] = 0$ . Dla łatwiejszego zapisu wprowadzamy operator całkowitej liczby cząstek w stanie  $\varphi_{\sigma i}$ , dany wyrażeniem  $\hat{n}_{\sigma i} = \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \hat{a}_{\sigma i}$ .

Podstawiając wyrażenie (3.5) do hamiltonianu (3.4), wykorzystując przy tym wzory (2.7) oraz (2.8), otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\sigma i, \sigma' j} \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\sigma i}^*(x) H_0 \varphi_{\sigma' j}(x) dx \right] \hat{a}_{\sigma' j} + \frac{1}{2} \sum_{ABCD} U_{ABCD} \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_C \hat{a}_D \\ &= \sum_i \left[ E_i (\hat{n}_{Li} + \hat{n}_{Ri}) - J_i (\hat{a}_{Li}^\dagger \hat{a}_{Ri} + \hat{a}_{Ri}^\dagger \hat{a}_{Li}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{ABCD} U_{ABCD} \hat{a}_A^\dagger \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_C \hat{a}_D. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Dla uproszczenia zapisu, w części hamiltonianu odpowiadającej za oddziaływania stany „lewo-prawo” oznaczamy indeksami w postaci liter A, B, C, D. Każda litera symbolizuje parę indeksów  $(\sigma, i)$ . Symbol  $U_{ABCD}$  oznacza zatem

$$U_{ABCD} = g \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_A^*(x) \varphi_B^*(x) \varphi_C(x) \varphi_D(x) dx. \quad (3.7)$$

W praktyce sprzężenie zespolone dwóch pierwszych funkcji pod całką (3.7) można zaniedbać, ponieważ wszystkie stany własne potencjału znalezione przez nas w podrozdziale 2.2 mają rzeczywiste funkcje falowe.

Warto w tym miejscu dodać, że hamiltonian (3.6) jest całkowicie równoważny hamiltonianowi (3.4) i podobnie jak on może opisywać układy o dowolnej liczbie cząstek.

### 3.3 Modele uproszczone

Opisany powyżej model pozwala ściśle wyznaczyć przebieg ewolucji stanu układu. W niektórych przypadkach można jednak zastosować uproszczone modele, w których znacznie ogranicza się bazę uwzględnianych stanów jednociąlowych bądź też pomija się niektóre procesy wpływające na dynamikę układu. W dalszej części pracy zbadamy, na ile dokładnie takie proste modele oddają stan faktyczny i w jakich okolicznościach można je z powodzeniem stosować. Skoncentrujemy się przy tym na dwóch konkretnych modelach.

#### 3.3.1 Model dwumodowy

Pierwszy z modeli zakłada ograniczenie uwzględnionych stanów własnych potencjału do dwóch najniższych, o  $n = 0$  i  $n = 1$ . Według definicji stanów bazy „lewo-prawo” (podrozdział 2.4) jest to równoważne założeniu, że stany jednociąlowe ograniczone są do  $\varphi_{L0}, \varphi_{R0}$ , z pominięciem stanów wzbudzonych (dla uproszczenia zapisu w tym przypadku pomijając będziemy indeks  $i = 0$  i nazwiemy je po prostu stanami  $\varphi_L, \varphi_R$ ). Takie założenie znacznie upraszcza zagadnienie dynamiki. Zaniedbane są bowiem wszystkie procesy związane z obsadzeniami wyższych stanów wzbudzonych. Rozkład (3.5) operatorów pola na operatory bazy „lewo-prawo” ma wówczas postać

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \hat{a}_L \varphi_L(x) + \hat{a}_R \varphi_R(x), \\ \hat{\psi}^\dagger(x) &= \hat{a}_L^\dagger \varphi_L^*(x) + \hat{a}_R^\dagger \varphi_R^*(x). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Podstawiamy te wzory do hamiltonianu (3.4), pamiętając przy tym, że:

1. Operatory kreacji (anihilacji) dla bozonów są względem siebie zawsze przemienne. Stąd np.  $\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_R = \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_L$ , itd. dla innych kombinacji.
2. Zachodzą równości:  $U_{LLLL} = U_{RRRR}$ ,  $U_{LLRR} = U_{RRLL} = U_{LRLR}$ ,  $U_{LLLR} = U_{LRRR} = U_{RLLL} = U_{RRRL}$ . Można o tym przekonać się na drodze bezpośredniego rachunku, zamieniając pod całką (3.7) funkcje falowe  $\varphi_L, \varphi_R$  na kombinacje liniowe stanów własnych potencjału  $\Phi_0, \Phi_1$  (wg wyrażen (2.6)) i odrzucając z powstałej sumy całkujące się do zera człony antysymetryczne (tj. te, w których antysymetryczny stan  $\Phi_1$  występuje w nieparzystej potędze).
3. Człon z  $E_0$  można pominąć, zakładając, że  $E_0 = 0$ . Można to osiągnąć, przyjmując w miejsce potencjału  $V(x)$  potencjał  $V(x) - E_0$ .

Ostatecznie otrzymujemy następującą, uproszczoną wersję hamiltonianu (3.6):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -J(\hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L + \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R) + \frac{U}{2}(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R) \\ & + T(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_R + \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_L) \\ & + \frac{V}{4}(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L + 4\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_R), \end{aligned} \quad (3.9)$$

gdzie przyjęliśmy standardowe oznaczenia literowe:

$$\begin{aligned} U = U_{LLLL} &= g \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_L(x)|^4 dx, \\ T = U_{LLLR} &= g \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_L(x)|^2 \varphi_L^*(x) \varphi_R(x) dx, \\ V = 2U_{LLRR} &= 2g \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_L(x)|^2 |\varphi_R(x)|^2 dx \end{aligned} \quad (3.10)$$

oraz  $J = J_0$ .

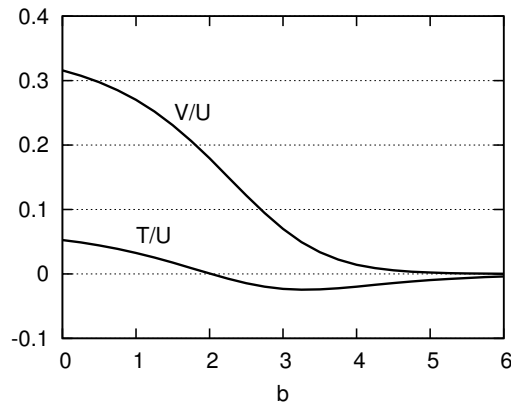
Parametr  $U$  oznacza siłę oddziaływań międzycząstkowych dwóch bozonów znajdujących się w tej samej studni. Parametr  $T$  odpowiada za tunelowanie pojedynczego bozonu pod wpływem oddziaływania z innym bozonem, zaś parametr  $V$  kontroluje proces jednoczesnego tunelowania pary bozonów z jednej studni do drugiej, a także oddziaływanie między bozonami znajdującymi się w przeciwnych studniach.

### 3.3.2 Model dwumodowy uproszczony

Ograniczenie bazy stanów jednociąlowych znacznie upraszcza rozważany model. Można jednak pójść jeszcze dalej i pominąć dwa parametry, zakładając  $V = T = 0$ . Jest to uzasadnione w granicy dużych  $b$ , gdzie pary funkcji „lewo-prawo” są niemal w całości ograniczone do przeciwnych obszarów i nie przekrywają się (patrz rozdział 2.4). Dlatego dla dużych  $b$  parametry  $V$  i  $T$  są małe w porównaniu z  $U$  (patrz rys. 3.1).

Po tym uproszczeniu hamiltonian (3.9) przybiera następującą postać:

$$\hat{H} = -J(\hat{a}_R^\dagger \hat{a}_L + \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_R) + \frac{U}{2}(\hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L \hat{a}_L + \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R \hat{a}_R). \quad (3.11)$$



**Rysunek 3.1:** Stosunki parametrów  $V/U$  oraz  $T/U$  w zależności od  $b$ . Widać, że dla dużych  $b$  parametry  $V$  i  $T$  są małe w porównaniu z  $U$  i zbiegają do zera. Warto zwrócić uwagę, że parametr  $T$  dla dużych  $b$  zmienia znak.

Jest to w gruncie rzeczy wariant modelu Bosego-Hubbarda w przybliżeniu tzw. ciasnego wiązania, stosowanego często do badania własności bozonów w potencjale okresowym. Model ten zakłada bazę stanów zlokalizowanych w poszczególnych węzłach sieci okresowego potencjału i uwzględnia jedynie wzajemne oddziaływania cząstek oraz ich tunelowanie z jednego oczka sieci do drugiego. Typowy model Bosego-Hubbarda zakłada nieskończoną sieć, w przeciwieństwie do naszego modelu, który zawiera jedynie dwa węzły sieci.

Hamiltonian (3.11) jest kontrolowany przez jeden parametr  $U/J$ . Parametr  $U/J$ , zależny od  $b$  oraz  $g$ , mówi nam, w jakim stopniu oddziaływania odgrywają rolę dominującą nad tunelowaniem. Dla każdej wysokości bariery  $b$  można przez zmianę  $g$  uzyskać dowolną pożądaną wartość  $U/J$ . Stosunek  $U/J$  zależy w skomplikowany sposób od wysokości bariery  $b$  oraz (jak wynika z wyrażen (3.3.1)) liniowo od  $g$ . Można wskazać wiele kombinacji parametrów  $b$  i  $g$ , dla których  $U/J$  będzie miało tę samą wartość. Spodziewamy się zatem, że dla takich przypadków przebieg ewolucji w tym modelu uproszczonym powinien być identyczny. Inaczej będzie dla modeli (3.6) i (3.9), gdyż w nich występują inne parametry, które mogą przybierać różne wartości dla tych samych  $U/J$ .

Możemy od razu przewidzieć, że dokładność przewidywań modeli dwumodowych będzie spadać w miarę zwiększania siły oddziaływań. Dla niskich  $g$  wyższe stany nie odgrywają wielkiej roli w dynamice układu (oczywiście zakładając, że układ nie jest już od początku w stanie wzbudzonym). Hamiltonian jednocząstkowy nie sprzęga bowiem ze sobą stanów o różnych poziomach wzbudzenia. Dopiero proporcjonalna do  $g$  część hamiltonianu odpowiedzialna za oddziaływania powoduje, że w dynamice zaczynają odgrywać rolę wyższe stany. Stąd można wnosić, że im silniejsze oddziaływania międzycząstkowe, tym większy będzie udział w dynamice stanów wzbudzonych. Tym samym modele pomijające te stany będą sprawdzać się gorzej.

### 3.4 Czasowe równanie Schrödingera dla dwóch bozonów

Do rozwiązania równania Schrödingera dla pełnego hamiltonianu (3.6) oraz dla dwóch hamiltonianów uproszczonych (3.9) i (3.11) posłużymy nam metodą numeryczną, analogiczną do tej opisaną w rozdziale 2.2. Najpierw przedstawiamy hamiltonian w

postaci macierzowej. Tym razem przedstawienie w bazie położeniowej  $x$  jest niepraktycznie, dlatego przedstawiamy go w bazie dwucząstkowych stanów Focka. Stany te oznaczamy kolejnymi liczbami naturalnymi  $|1\rangle, |2\rangle, \dots$  przy czym każdy taki stan reprezentuje pewien stan dwucząstkowy:  $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_L^\dagger\hat{a}_L^\dagger|\text{vac}\rangle$ ,  $|2\rangle = \hat{a}_L^\dagger\hat{a}_R^\dagger|\text{vac}\rangle$ ,  $|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_R^\dagger|\text{vac}\rangle$ , itd.

Elementem macierzowym hamiltonianu odpowiadającym jakiejś parze stanów dwucząstkowych  $|i\rangle, |j\rangle$  będzie  $\langle i|\hat{H}|j\rangle$ . W pełnym modelu ( $n_{max} = 30$ ) możliwych stanów dwucząstkowych jest  $\frac{1}{2}(n_{max} + 1)(n_{max} + 2) = 465$ . Zatem wymiar macierzowej postaci hamiltonianu wynosi  $465 \times 465$ . W modelach uproszczonych ( $n_{max} = 1$ ) wymiar macierzy równy jest  $3 \times 3$ .

Hamiltonian dwumodowy (3.9) w postaci macierzowej wygląda następująco:

$$\hat{H}_{2mode} = \begin{bmatrix} U & \sqrt{2}T - \sqrt{2}J & \frac{1}{2}V \\ \sqrt{2}T - \sqrt{2}J & V & \sqrt{2}T - \sqrt{2}J \\ \frac{1}{2}V & \sqrt{2}T - \sqrt{2}J & U \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Poszczególne rzędy i kolumny odpowiadają kolejno dwucząstkowym stanom Focka  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ . Postać macierzowa uproszczonego hamiltonianu (3.11) jest z kolei następująca:

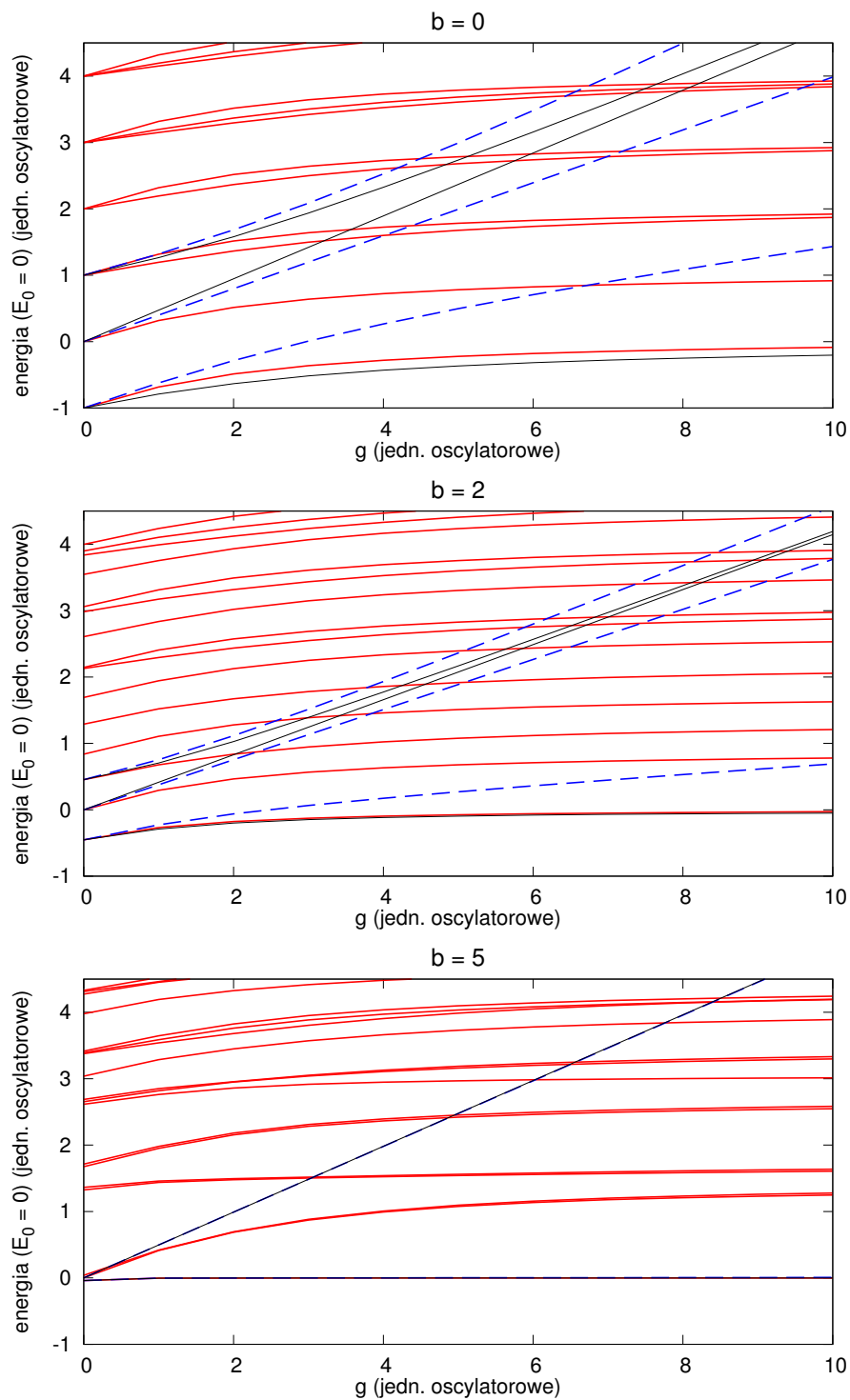
$$\hat{H}_R = \begin{bmatrix} U & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & U \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

Diagonalizując odpowiedni hamiltonian, otrzymujemy zestaw stanów własnych  $|v_i\rangle$  i odpowiadające im energie własne  $\lambda_i$ . Zakładając, że układ jest na początku w stanie  $|ini\rangle$ , ewolucję stanu w czasie obliczamy w standardowy sposób:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|ini\rangle = \sum_i \alpha_i e^{-i\lambda_i t} |v_i\rangle, |\psi(t)\rangle = \sum_i \alpha_i e^{-i\epsilon_i t} |i\rangle \quad (3.14)$$

gdzie  $|\Psi(t)\rangle$  to stan układu w chwili  $t$ , a współczynniki  $\alpha_i = \langle v_i | ini \rangle$ .

Na rys. 3.2 przedstawione są energie własne pełnego hamiltonianu (3.6) oraz hamiltonianów uproszczonych (3.9) i (3.11) w zależności od parametrów  $b$  oraz  $g$ . Na wykresie widoczna jest charakterystyczne rozmieszczenie energii własnych hamiltonianu w modelu pełnym. Dla  $b = 0$  są one wyraźnie pogrupowane w multiplety o regularnie wzrastającej liczebności. Poszczególne multiplety są położone od siebie w regularnych odstępach, a regularność ta nie znika nawet dla wysokich  $g$ . Dla  $b = 2$  liczebność i rozmieszczenie multipletów zatracają tę regularność, a granice między nimi zacierają się. Dla  $b = 5$  energie są znów widocznie pogrupowane, lecz już nie tak regularnie jak dla  $b = 0$ . Jak już wspomniano w punkcie 3.3.2, w granicy dużych  $b$  parametry  $V, T$  są zaniedbywalne i model dwumodowy (3.9) sprowadza się do prostszej wersji (3.11). Dlatego w miarę wzrostu  $b$  energie własne hamiltonianów dla obu tych modeli uproszczonych zbliżają się do siebie. Dla  $b = 5$  oba modele dają praktycznie identyczne wyniki co do energii własnych. Energie własne hamiltonianów modeli uproszczonych tylko dla  $g$  bliskich zeru są zbliżone do energii pełnego modelu. W miarę wzrostu  $g$  ta dokładność odwzorowania zupełnie znika. Energie w uproszczonych modelach rosną niemal liniowo wraz z  $g$ , z bardzo dużym nachyleniem. Wyjątkiem jest najniższa energia własna modelu dwumodowego (3.11), która nawet dla bardzo silnych oddziaływań bardzo dobrze odwzorowuje najniższą energię modelu pełnego. W granicy dużych  $b$  najniższa energia własna w obu modelach uproszczonych jest równa najniższej energii w modelu pełnym.



**Rysunek 3.2:** Energie własne hamiltonianu układu dwucząstkowego w zależności od  $g$ , dla różnych wartości  $b$ . Zakładamy  $E_0 = 0$ . Linia gruba (czerwona): kolejne energie własne wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): energie własne wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11). Dla  $b = 5$  oba modele uproszczone dają praktycznie identyczne wyniki, a ponadto najniższa energia własna jest taka sama we wszystkich trzech modelach.

## Rozdział 4

# Parametry charakteryzujące stan układu

W tym rozdziale dokonamy wyboru parametrów, których zmiany w czasie dadzą nam wgląd w stan układu. Pozwoli to jasno zobrazować ewolucję układu i umożliwić jej łatwe porównanie z wynikami uzyskanymi z poszczególnych modeli uproszczonych. W tym rozdziale wprowadzamy i omawiamy cztery parametry stanu układu. Są to: populacja prawej studni  $N_R(t)$ , prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach  $\mathcal{P}(t)$  oraz miara korelacji  $K$  i entropia von Neumanna  $S$ , związane z jednocząstkową zredukowaną macierzą gęstości  $\hat{\rho}^{(1)}$ .

### 4.1 Populacja studni

Zmiana rozmieszczenia bozonów w przestrzeni stanowi jeden z najbardziej oczywistych przejawów ewolucji stanu układu. Fakt, że przestrzeń rozdzieliliśmy na dwa odrębne obszary podpowiada nam, że naturalną charakterystyką rozmieszczenia przestrzennego bozonów jest pojedyncza liczba, oznaczająca populację bozonów w jednej ze studni (np. prawej). Zazwyczaj populację studni oblicza się po prostu jako sumę operatorów liczby cząstek po wszystkich stanach danej studni:

$$N_\sigma(t) \approx \sum_i \langle \Psi(t) | \hat{n}_{\sigma i} | \Psi(t) \rangle, \quad (4.1)$$

gdzie  $\sigma = L$  lub  $\sigma = R$  w zależności od tego, która studnia nas interesuje. Jednak taka metoda nie bierze pod uwagę faktu, że funkcje falowe stanów „lewo-prawo” nie są w całości zlokalizowane w obszarze jednej studni (patrz rys. 2.6) i np. funkcje  $\varphi_{Li}$  zachodzą częściowo na prawą studnię (szczególnie dla małych  $b$ ). Dlatego populację danej studni będziemy wyliczać bezpośrednio z gęstości liczby cząstek w obszarze danej studni. W tym celu wprowadzamy najpierw operator jednocząstkowej gęstości  $\hat{n}(x)$ :

$$\hat{n}(x) = \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x). \quad (4.2)$$

Operator ten wyraża gęstość liczby bozonów w danym punkcie  $x$ . Jego rozkład na operatory bazy „lewo-prawo” jest następujący:

$$\hat{n}(x) = \sum_{\sigma, i, \sigma', j} \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \hat{a}_{\sigma' j} \varphi_{\sigma i}^*(x) \varphi_{\sigma' j}(x). \quad (4.3)$$

Całkowita populacja prawej studni  $N_R(t)$  równa jest wartości oczekiwanej operatora  $\hat{n}(x)$  wycalkowanej po prawym obszarze:

$$N_R(t) = \int_0^{\infty} \langle \Psi(t) | \hat{n}(x) | \Psi(t) \rangle dx = \sum_{\sigma, i, \sigma', j} \left( \langle \Psi(t) | \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \hat{a}_{\sigma' j} | \Psi(t) \rangle \int_0^{\infty} \varphi_{\sigma i}^*(x) \varphi_{\sigma' j}(x) dx \right). \quad (4.4)$$

W każdej chwili czasu  $t$  zachodzi  $0 \leq N_R(t) \leq N$ , przy czym w naszym przypadku  $N = 2$ . Oczywiście populacja drugiej, lewej studni równa jest  $N_L(t) = N - N_R(t)$ .

## 4.2 Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach

Korelacje międzycząstkowe stanowią charakterystyczną cechę układów silnie skorelowanych. Silne oddziaływania między cząstkami mogą wywoływać powstanie pewnych korelacji między stanem poszczególnych cząstek, co może wpływać np. na ich wzajemne rozmieszczenie w przestrzeni. Prawdopodobieństwo  $\mathcal{P}(t)$  znalezienia bozonów w przeciwnych studniach stanowi wygodną i prostą metodę pokazania efektów korelacji międzycząstkowych.  $\mathcal{P}(t)$  określa prawdopodobieństwo, że w danej chwili  $t$  oba bozony zostaną znalezione w przeciwnych studniach (jeden bozon w obszarze  $x < 0$ , drugi w obszarze  $x > 0$ ). By uzyskać ścisłą wartość  $\mathcal{P}$ , należy zdefiniować operator gęstości dwucząstkowej w bazie położeniowej  $\hat{n}(x_1, x_2)$ , wyrażony wzorem

$$\hat{n}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \hat{\psi}^\dagger(x_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2) \hat{\psi}(x_2) \hat{\psi}(x_1). \quad (4.5)$$

Jest on analogiczny do operatora (4.2) i określa prawdopodobieństwo znalezienia jednej cząstki w punkcie  $x_1$  oraz drugiej w punkcie  $x_2$ . Współczynnik  $\frac{1}{2}$  normuje gęstość do jedności. Tak otrzymaną wielkość całkujemy po wszystkich  $x_1$  w obszarze prawym i po  $x_2$  w obszarze lewym.  $\mathcal{P}$  jest równe wartości oczekiwanej tego operatora:

$$\mathcal{P}(t) = 2 \int_0^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^0 dx_2 \langle \Psi(t) | \hat{n}(x_1, x_2) | \Psi(t) \rangle. \quad (4.6)$$

Opisana metoda jest jednak niepraktyczna ze względu na jej złożoność obliczeniową. Wymaga ona bowiem obliczenia wartości oczekiwanej operatora  $\hat{n}(x_1, x_2)$  dla każdej pary  $x_1, x_2$ . Ponieważ posługujemy się przybliżeniem  $x$  w postaci siatki  $\mathcal{N}$  dyskretnych punktów (patrz podrozdział 2.2), wymagałoby to obliczenia  $\mathcal{N}^2$  wartości w każdej badanej chwili czasu  $t$ .

Z tego powodu wyznaczamy  $\mathcal{P}$  w sposób uproszczony, jako sumę w danej chwili  $t$  po prawdopodobieństwach wszystkich dwucząstkowych stanów Focka, w których obsadzony jest jeden stan  $L$  oraz jeden stan  $R$ :

$$\mathcal{P}(t) \approx \sum_{ij} |\langle \text{vac} | \hat{a}_{Li} \hat{a}_{Rj} | \Psi(t) \rangle|^2. \quad (4.7)$$

Metoda ta nie jest całkowicie dokładna z powodu opisanego już nakładania się funkcji falowych stanów  $L$  i  $R$ . W praktyce stany, w których oba bozony znajdowałyby się w tej samej studni, również dawałyby jakiś wkład do wartości  $\mathcal{P}$ . Możemy jednak zdecydować się na zaniedbanie tych efektów, ponieważ chodzi nam bardziej o stwierdzenie ogólnych trendów niż o dokładne wyniki liczbowe.

### 4.3 Widmo jednocząstkowej macierzy gęstości

Stan całego układu dwucząstkowego jest opisany wektorem  $|\Psi(t)\rangle$ . Jest to stan czysty podczas całej ewolucji w czasie. Opisanie stanu pojedynczej cząstki tego układu jest już bardziej skomplikowane. Ze względu na pojawiające się korelacje w układzie jest to bowiem najczęściej stan mieszany, stanowiący probabilistyczną mieszaninę różnych jednocząstkowych stanów czystych. Stan mieszany wymaga opisu za pomocą operatora zwanego macierzą gęstości  $\hat{\rho}$ . W tym przypadku będzie to *zredukowana* (tj. opisująca podukład), jednocząstkowa macierz gęstości  $\hat{\rho}^{(1)}$ . Ponieważ bozony są identyczne, ta sama zredukowana macierz gęstości opisuje każdy z nich. Definicja tego operatora (wyrażonego w bazie położeniowej, gdzie każdy element opisują indeksy  $x, x'$ ) jest następująca:

$$\rho^{(1)}(x, x'; t) = \langle \Psi(t) | \hat{\psi}^\dagger(x') \hat{\psi}(x) | \Psi(t) \rangle. \quad (4.8)$$

Łatwo sprawdzić, że operator ten jest operatorem hermitowskim. Dlatego można go zdiagonalizować i zapisać w postaci sumy odpowiednich operatorów rzutowych na jego stany własne:

$$\frac{1}{N} \hat{\rho}^{(1)} = \sum_k P_k |w_k\rangle \langle w_k|, \quad (4.9)$$

gdzie  $|w_k\rangle$  i  $P_k$  to odpowiednio wektory własne (naturalne orbitale jednociąłowe) i wartości własne (prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w danym orbitalu) zredukowanej macierzy gęstości.  $N$  oznacza liczbę cząstek (w naszym przypadku  $N = 2$ ).

To, czy stan kwantowy pojedynczej cząstki jest czysty, czy mieszany (oraz to, jak daleki jest on od stanu czystego) ma znaczenie praktyczne. Jeśli chcemy poznać stan całego układu na drodze eksperymentalnej poprzez pomiar stanu kwantowego poszczególnych cząstek, wówczas tym mniej możemy wnioskować o stanie dwucząstkowego układu, im bardziej jednocząstkowa macierz gęstości odbiega od stanu czystego. Jeśli zredukowana macierz gęstości opisuje stan czysty, wówczas znamy ze 100% pewnością stan obu cząstek. Wszystkie bozony są bowiem dokładnie w tym samym stanie jednociąłowym, opisanym odpowiednim orbitalem  $|w_k\rangle$ . Mamy zatem 100% pewność co do stanu całego układu dwucząstkowego. Im więcej jest niezerowych prawdopodobieństw  $P_k$  i im bardziej są one do siebie porównywalne, tym bardziej wzrasta nasza niewiedza o stanie pojedynczych cząstek.

Zredukowana macierz gęstości pośrednio charakteryzuje korelacje międzycząstkowe powstające na skutek oddziaływań. Narastanie korelacji powoduje pojawianie się w rozkładzie  $\hat{\rho}^{(1)}$  kolejnych niezerowych wartości własnych  $P_k$  i oddalanie się od stanu czystego [29]. Oznacza to, że widmo  $\hat{\rho}^{(1)}$  może posłużyć nam do zweryfikowania, w jakim stopniu te korelacje, stanowiące istotną część opisu układów silnie skorelowanych, są poprawnie odtwarzane przez modele uproszczone.

Aby łatwo porównać wyniki z trzech różnych modeli, należy wybrać jakąś miarę, która wyraża, jak bardzo  $\hat{\rho}^{(1)}$  odbiega od stanu czystego. Zwróciliśmy już uwagę, że narastanie niezerowych  $P_k$  wiąże się bezpośrednio ze wzrostem niewiedzy o układzie. Sugeruje to, że powinniśmy się posłużyć wielkością analogiczną do entropii informacyjnej. W kwantowej mechanice statystycznej jej odpowiednikiem jest *entropia von Neumanna*  $S$ , wyrażona wzorem:

$$S = - \sum_k P_k \ln P_k. \quad (4.10)$$



Dla zredukowanej macierzy gęstości opisującej stan czysty  $S = 0$ . Jeśli macierz gęstości jest maksymalnie „zmieszana”, tzn. ma  $n$  identycznych wartości własnych  $P_k = \frac{1}{n}$ , entropia osiąga wartość maksymalną  $S = \ln n$ . Inną miarą liczbową niosącą informację o czystości stanu kwantowego jest stopień korelacji  $K$ , wprowadzony w pracy [29]:

$$K = \left( \sum_k P_k^2 \right)^{-1}. \quad (4.11)$$

Liczbę  $K$  można interpretować jako efektywną liczbę jednocząstkowych orbitali, wchodzących w skład stanu kwantowego cząstki [23]. Dla stanu czystego  $K = 1$ , zaś dla macierzy o  $n$  identycznych wartościach  $P_k$  otrzymujemy  $K = n$ .

# Rozdział 5

## Dynamika układu

Po dokładnym omówieniu rozważanego problemu możemy przejść do przedstawienia otrzymanych wyników badań. W tym rozdziale numerycznie wyznaczamy ewolucję stanu układu dwóch bozonów znajdujących się w chwili początkowej w dobrze określonym stanie, dla różnych, zmieniających się parametrów. Ścisła dynamika zostanie porównana z modelami uproszczonymi, umożliwiając w ten sposób zidentyfikowanie zakresu ich stosowalności.

### 5.1 Bozony początkowo w tej samej studni

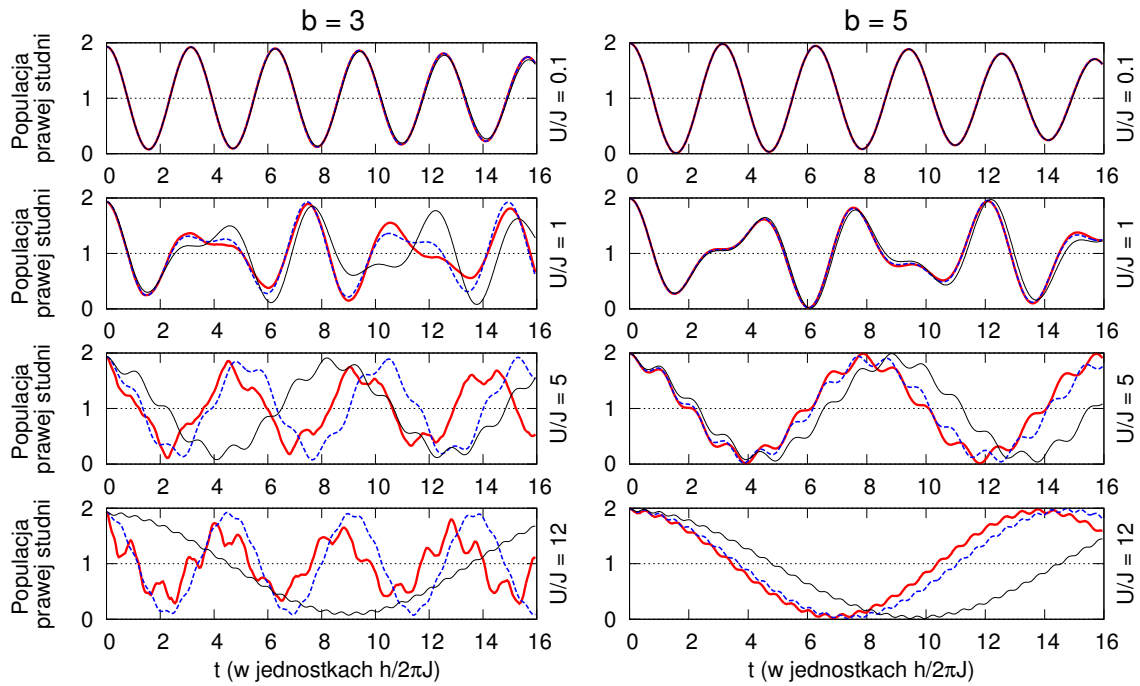
W tej części pracy założymy, że w chwili początkowej oba bozony znajdują się w tej samej studni. Jedynymi takimi stanami dopuszczalnymi przez wszystkie trzy rozważane modele są  $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_{L0}^\dagger\hat{a}_{L0}^\dagger|\text{vac}\rangle$  i  $|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_{R0}^\dagger\hat{a}_{R0}^\dagger|\text{vac}\rangle$ . Ze względu na symetrię problemu dynamika jest jakościowo identyczna dla obu tych stanów początkowych. Na potrzeby pracy decydujemy się na umieszczenie obu bozonów w studni prawej, a więc stan początkowy  $|\text{ini}\rangle = |3\rangle$ .

Porównujemy wyniki przy dwóch różnych wysokościach bariery oraz różnej sile oddziaływań, której jednak nie definiujemy bezpośrednio poprzez parametr  $g$ , lecz przez  $U/J$ . Pozwala to łatwiej porównać wyniki z różnych modeli, gdyż hamiltonian w najprostszym modelu (3.11) zależy jedynie od wartości  $U/J$ . Dla każdej wysokości bariery wartość parametru  $g$  dobieramy w taki sposób, by osiągnąć jeden z czterech różnych reżimów oddziaływania: od oddziaływań słabych ( $U/J = 0, 1$ ) do silnych ( $U/J = 12$ ).

#### 5.1.1 Populacja prawej studni

Rys. 5.1 przedstawia ewolucję populacji prawej studni  $N_R(t)$  dla różnych wartości parametrów  $b$  i  $U/J$ . W potencjale wysokiej bariery ( $b = 5$ ), niezależnie od siły oddziaływań, oba modele uproszczone bardzo dobrze odtwarzają pełną dynamikę. Jedynie dla bardzo wysokich  $U/J$  zauważalne stają się różnice w częstości oscylacji między modelem pełnym a modelami uproszczonymi. Widać to na wykresie jako narastająca niezgodność fazy. Jest to szczególnie widoczne dla najprostszego modelu (3.11). Jednak pod względem jakościowym modele uproszczone doskonale odtwarzają ewolucję populacji.

Inaczej jest w przypadku niskiej bariery ( $b = 3$ ), gdzie stają się widoczne różnice między oboma modelami uproszczonymi. W przypadku słabych oddziaływań oba mo-



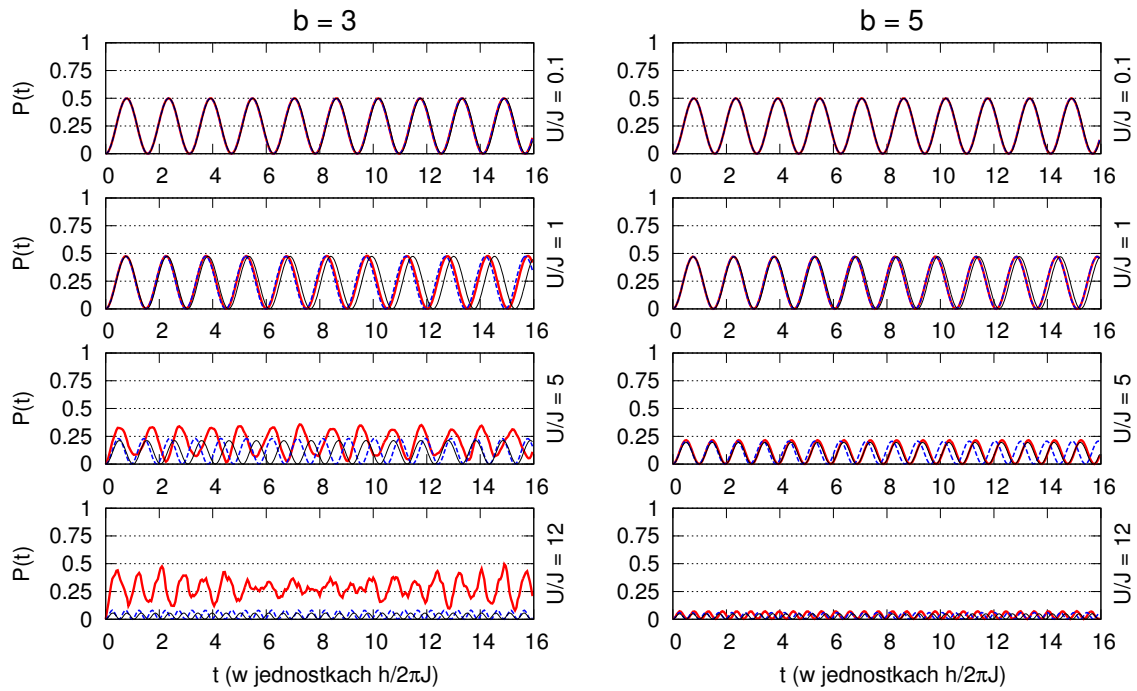
**Rysunek 5.1:** Ewolucja populacji prawej studni  $N_R(t)$  w czasie, dla dwóch różnych wysokości bariery i różnych sił oddziaływania  $U/J$ , przy początkowym stanie  $|3\rangle$ . Linia gruba (czerwona): dynamika wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): dynamika wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11).

dele wciąż jeszcze poprawnie odtwarzają ścisłą dynamikę. Jednak dla wyższych  $U/J$ , podczas gdy model dwumodowy (3.9) nadal dość dobrze odtwarza kształt i częstość oscylacji populacyjnych, uproszczony model (3.11) zaczyna dawać błędne wyniki. Jest to szczególnie widoczne dla  $U/J = 12$ , gdzie wyraźnie widać przewagę modelu (3.9) nad (3.11).

### 5.1.2 Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach

Poprawny model powinien dobrze odtwarzać korelacje międzycząstkowe. Najprostszym przykładem takiej korelacji jest prawdopodobieństwo  $\mathcal{P}(t)$ , że dwa bozony zostaną znalezione w chwili  $t$  w przeciwnych studniach.

W uproszczonym modelu (3.11) najważniejszym czynnikiem, wpływającym na wartość  $\mathcal{P}$ , jest zjawisko „par związanych odpychająco” (*repulsively bound pairs*). Wynika ono z zasady zachowania energii i powoduje, że w miarę wzrostu odpychających oddziaływań  $g$  para bozonowa jest mocniej związana [30]. Intuicyjnie można to zrozumieć następująco. Stan układu, w którym dwie oddziałujące cząstki przebywają w jednej studni, ma wyższą energię od stanu, w którym przebywają one w oddzielnych studniach. Ta różnica energii wynosi  $U$  i jest znacznie wyższa niż amplituda tunelowania  $J$ . Dlatego jeśli cząstki umieścimy już na wstępie w jednej studni, to (ze względu na fakt, że układ jest zamknięty) nie jest możliwe, aby dynamika prowadziła do stanu, w którym cząstki znajdują się w studniach przeciwnych. Układ będzie raczej oscylował między stanami o tej samej energii. Jest to możliwe jako proces dru-



**Rysunek 5.2:** Ewolucja w czasie prawdopodobieństwa znalezienia dwóch bozonów w przeciwnych studniach  $\mathcal{P}(t)$  dla różnych wysokości bariery i różnych sił oddziaływania  $U/J$ , przy początkowym stanie  $|3\rangle$ . Linia gruba (czerwona): dynamika wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): dynamika wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11).

giego rzędu w tunelowaniu.

Hamiltonian modelu (3.9), uwzględniający więcej procesów, zawiera człon z parametrem  $T$ , który odpowiada za tunelowanie pojedynczych cząstek i tym samym ułatwia rozdzielanie pary bozonowej. Jednak zawiera on też człon z  $V$ , który wspiera tunelowanie obu bozonów naraz. Poza tym  $V, T$  są małe w porównaniu z  $U$  (patrz rys. 3.1) i nie odgrywają większej roli, zatem wartość  $\mathcal{P}(t)$  odtwarzana przez modele (3.9) i (3.11) jest podobna.

Pełny model, uwzględniający stany wzbudzone, umożliwia dodatkowe mechanizmy tunelowania. W hamiltonianie (3.6) człony odpowiadające za oddziaływania powodują sprzężenie niższych stanów z wyższymi (tym silniejsze, im wyższa jest wartość parametru  $g$ ). Bozony w stanie wzbudzonym mogą łatwiej tunelować między studniami, ponieważ amplitudy tunelowania  $J_i$ , równe różnicom między parami jednocząstkowych energii własnych (patrz rys. 2.3), są dla nich wyższe. Poza tym człony z parametrami typu np.  $U_{R_0R_0L_1R_0}$  bezpośrednio indukują tunelowanie pojedynczych bozonów, ułatwiając rozdzielanie pary bozonowej.

Tunelowanie przez wyższe stany nie ma jednak większego znaczenia w sytuacji, gdy bariera jest wysoka. Wynika to z faktu, że w granicy dużych  $b$  amplitudy  $J_i$  dla wyższych  $i$  są małe (patrz rys. 2.3). Ponadto indukowane przez oddziaływanie tunelowanie pojedynczych cząstek, kontrolowane przez odpowiednie człony  $U_{ABCD}$ , dążą do zera dla wysokich barier.

Rys. 5.2 przedstawia ewolucję prawdopodobieństwa  $\mathcal{P}(t)$  dla różnych wartości parametrów  $b$  i  $U/J$ . Na wykresie dla  $b = 5$  widać, że prawdopodobieństwo  $\mathcal{P}$  spada

wyraźnie w miarę wzrostu siły oddziaływań. Ponieważ tunelowanie przez wyższe stany nie odgrywa dla  $b = 5$  praktycznie żadnej roli, dynamika  $\mathcal{P}(t)$  w modelach uproszczonych jest jakościowo identyczna z dynamiką w modelu pełnym.

Inaczej jest w przypadku niskiej bariery ( $b = 3$ ). W reżimie słabych oddziaływań sprzężanie stanów niskich ze wzbudzonymi jest nieznaczące, więc nie zachodzą wyraźne różnice między dynamiką w modelu pełnym a dynamiką w modelach uproszczonych. Jednak dla silnych oddziaływań tunelowanie poprzez stany wzbudzone wyraźnie dominuje, dzięki czemu  $\mathcal{P}(t)$  jest wyższe: oscyluje między wartościami ok.  $1/4$  a  $1/2$ , nie zbliżając się do zera. Tymczasem modele uproszczone, które nie dostrzegają możliwości tunelowania przez wyższe stany, dają błędne wyniki: według nich  $\mathcal{P}(t)$  dla silnych oddziaływań spada do wartości bliskich zeru, identycznie, jak w przypadku  $b = 5$ .

Zwróćmy uwagę na przypadek  $b = 3$  przy silnych oddziaływań. Jak pamiętamy, w tym reżimie model dwumodowy (3.9) poprawnie odtwarzał dynamikę populacji studni (patrz rys. 5.1). Okazuje się jednak, że przy identycznych parametrach eksperymentalnych ten sam model błędnie odtwarza prawdopodobieństwo  $\mathcal{P}(t)$ . Wynika stąd, że nawet niepoprawny model może na pozór dobrze odtwarzać dynamikę układu, jeśli nie zweryfikuje się jego dokładności dla więcej niż jednego parametru charakteryzującego stan układu.

### 5.1.3 Charakterystyka widma jednocząstkowej macierzy gęstości

Widmo jednocząstkowej macierzy gęstości  $\hat{\rho}^{(1)}$  można scharakteryzować poprzez opisane wcześniej wielkości  $S$  i  $K$ . Przypomnijmy, że wielkości te pośrednio charakteryzują narastanie korelacji międzycząstkowych. Rys. 5.3 przedstawia ich ewolucję dla różnych wartości parametrów  $b$  i  $U/J$ .

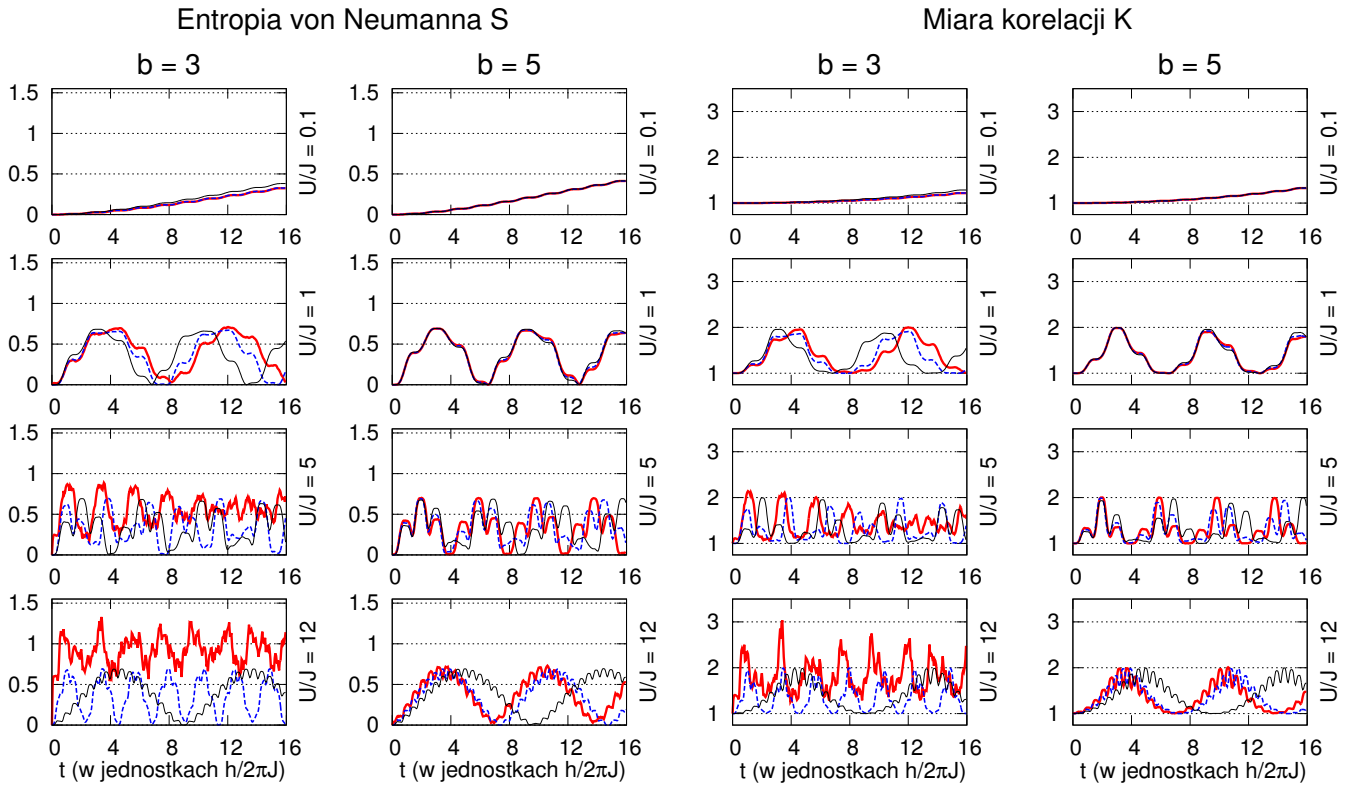
Od razu widać zależność między parametrami eksperymentalnymi, a stopniem skorelowania układu. W reżimie niskiej bariery  $b = 3$  wielkości  $S$  i  $K$  wyraźnie wzrastają w miarę zwiększania parametru  $U/J$ . Odpowiada to narastaniu korelacji pod wpływem coraz silniejszych oddziaływań międzycząstkowych. Inaczej jest w reżimie wysokiej bariery ( $b = 5$ ), w którym wielkości  $S$  i  $K$ , niezależnie od wartości  $U/J$ , nie przekraczają pewnych wartości granicznych (tj.  $K \approx 2, S \approx \ln 2$ ). Sugeruje to, że obecność wysokiej bariery utrudnia powstawanie silnych korelacji.

Modele uproszczone dla  $b = 5$  z bardzo dobrą dokładnością reprodukuja wyniki modelu pełnego, nie licząc pojawiającej się niezgodności fazy dla wysokich  $U/J$ . Dla  $b = 3$  dają one poprawne wyniki jedynie dla słabych oddziaływań. Szczególnie dla  $U/J = 12$  wyraźnie zaniżają wartość wielkości  $S$  i  $K$ . Widać zatem, że modele dwumodowe nie potrafią poprawnie odtworzyć silnych korelacji.

## 5.2 Bozony początkowo w przeciwnych studniach

Teraz omówimy dynamikę układu w sytuacji, gdy w stanie początkowym oba bozony umieszczone są w przeciwnych studniach. Jedyнным takim stanem dostępnym dla wszystkich trzech modeli jest stan  $|2\rangle = \hat{a}_{L0}^\dagger \hat{a}_{R0}^\dagger |\text{vac}\rangle$ . Chcemy przekonać się, czy pod wpływem zmiany stanu początkowego wystąpią znaczące różnice w zakresie stosowności modeli uproszczonych.

Tym razem dynamiki populacji  $N_R(t)$  nie przedstawiliśmy na wykresie. Jest ona bowiem trywialna niezależnie od modelu: w każdej chwili populacja obu studni równa



**Rysunek 5.3:** Ewolucja w czasie entropii von Neumanna  $S$  i miary korelacji  $K$  dla różnych wysokości bariery i różnych sił oddziaływania  $U/J$ , przy początkowym stanie  $|3\rangle$ . Linia gruba (czerwona): dynamika wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): dynamika wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11).

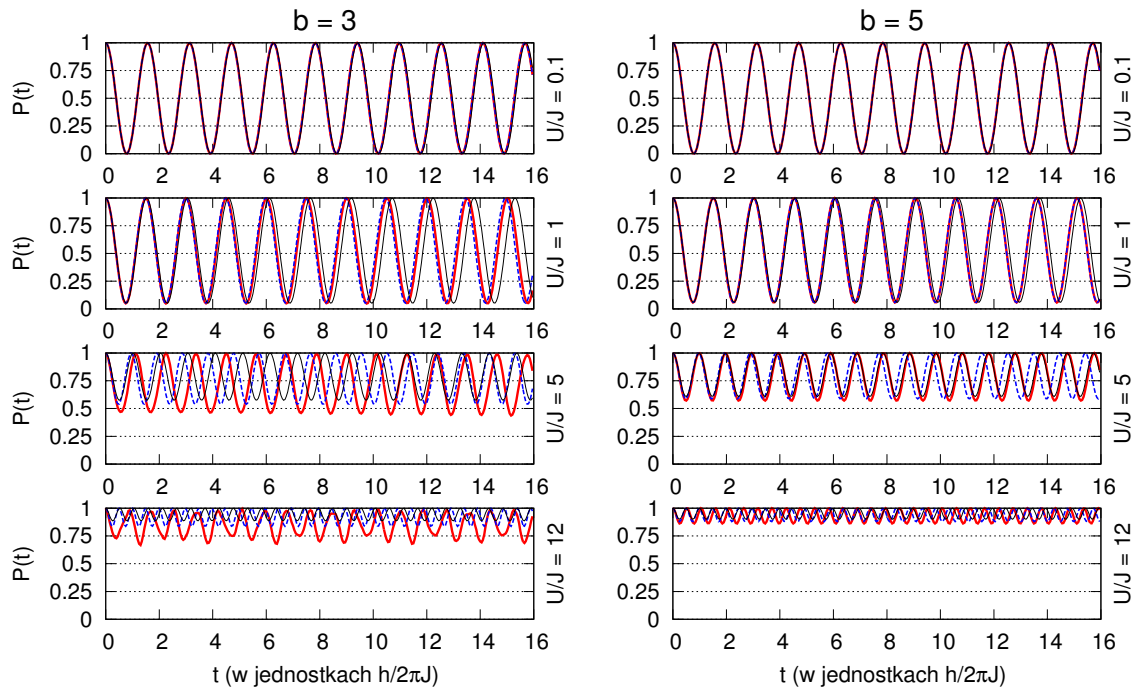
jest 1, niezależnie od parametrów  $b$  i  $g$ . Wynik ten jest zgodny z intuicją. W obrazie jednociałowej gęstości nie istnieje żaden powód, aby (w sensie średnim) gęstość koncentrowała się w jakimś obszarze przestrzeni.

### 5.2.1 Prawdopodobieństwo znalezienia bozonów w przeciwnych studniach

Na rys. 5.4 przedstawiona jest ewolucja prawdopodobieństwa  $\mathcal{P}(t)$  dla różnych wartości parametrów  $b$  i  $U/J$ . Wyniki są analogiczne do tych, które uzyskaliśmy przy stanie początkowym  $|3\rangle$ .

W przypadku wysokiej bariery ( $b = 5$ ) dolna amplituda oscylacji  $\mathcal{P}(t)$  rośnie wraz ze wzrastaniem siły oddziaływań, ponieważ te same odpychające oddziaływania, które wiążą mocniej parę bozonową w jednej studni, jednocześnie utrudniają rozdzielonym początkowo bozonom znalezienie się w jednej studni. Modele uproszczone niemal idealnie oddają dynamikę, niezależnie od wartości  $U/J$ .

W reżimie niskiej bariery ( $b = 3$ ) wraz ze wzrostem siły oddziaływań coraz bardziej dominującą rolę odgrywają stany wzbudzone. Dlatego przewidywania modeli uproszczonych dla wysokich  $U/J$  zaczynają odbiegać od ścisłej dynamiki. Dla  $U/J = 5$  amplituda oscylacji  $\mathcal{P}(t)$  jest wciąż jeszcze bardzo podobna w modelu pełnym i modelach dwumodowych. Dla  $U/J = 12$  modele uproszczone zawyżają wartość prawdopodo-



**Rysunek 5.4:** Ewolucja w czasie prawdopodobieństwa znalezienia dwóch bozonów w przeciwnych studniach  $\mathcal{P}(t)$  dla różnych wysokości bariery i różnych sił oddziaływania  $U/J$ , przy początkowym stanie  $|2\rangle$ . Linia gruba (czerwona): dynamika wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): dynamika wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11).

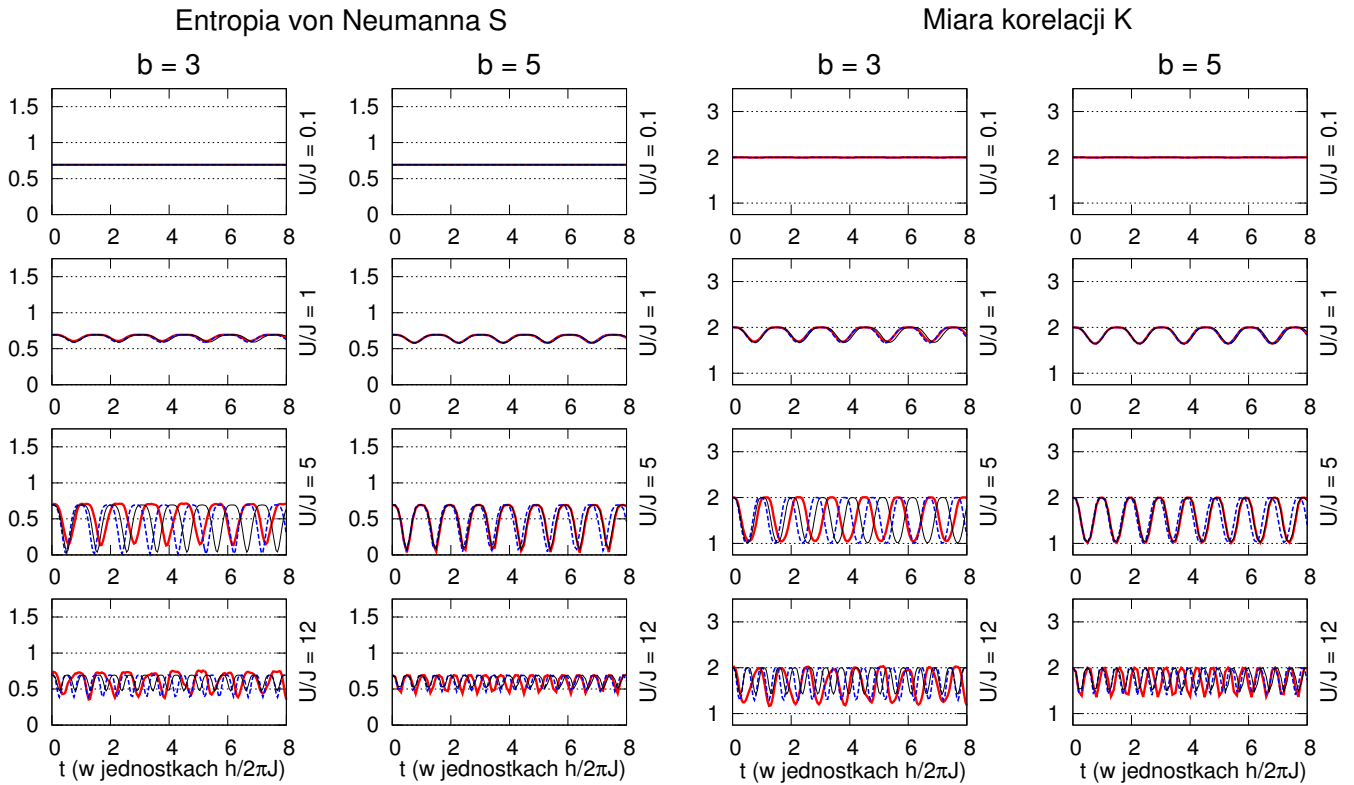
bieństwa  $\mathcal{P}(t)$ , ale ich niezgodność z modelem ścisłym nie jest równie wyraźna, co w przypadku stanu początkowego  $|3\rangle$  (porównaj rys. 5.2).

### 5.2.2 Charakterystyka widma jednocząstkowej macierzy gęstości

Rys. 5.5 przedstawia ewolucję wielkości  $S$  i  $K$  dla różnych wartości parametrów  $b$  i  $U/J$ . W stanie początkowym stan pojedynczego bozonu jest mieszany i na początku  $\hat{\rho}^{(1)}$  ma dwie wartości własne równe  $\frac{1}{2}$ . Dlatego w chwili początkowej  $S = \ln 2$ ,  $K = 2$ . Później obie te wielkości oscylują między dwiema granicami, które zmieniają się w zależności od siły oddziaływań.

Możemy przekonać się, że stan początkowy układu wywiera pewien wpływ na dynamikę widma jednocząstkowej macierzy gęstości, a tym samym na wielkość korelacji obecnych w układzie. Porównajmy na przykład dynamikę w reżimie  $b = 3, U/J = 12$  przy różnych stanach początkowych. Jeśli oba bozony są na początku w tej samej studni, wówczas w tym reżimie pojawiają się bardzo silne korelacje (patrz rys. 5.3): wartość  $S$  oscyluje między granicami 0.5 a 1.5, a wartość  $K$  między 1.5 a 3. Gdy jednak z początku oba bozony są w przeciwnych studniach (rys. 5.5), wielkości te są zauważalnie mniejsze:  $S$  zawiera się w granicach między ok. 0.5 a 0.75, zaś  $K$  w granicach ok. 1.5 a 2. Można stąd wnioskować, że przy tym stanie początkowym układ jest słabiej skorelowany, niż w poprzednim przypadku.

Tym razem oba modele dwumodowe poprawnie odtwarzają dynamikę  $S$  i  $K$ , niezależnie od parametrów eksperymentalnych. Dokładność tych modeli jest bardzo do-



**Rysunek 5.5:** Ewolucja w czasie entropii von Neumanna  $S$  i miary korelacji  $K$  dla różnych wysokości bariery i różnych sił oddziaływania  $U/J$ , przy początkowym stanie  $|2\rangle$ . Linia gruba (czerwona): dynamika wg modelu pełnego (3.6). Linia przerywana (niebieska) i linia cienka (czarna): dynamika wg uproszczonych modeli, odpowiednio (3.9) i (3.11).

bra nawet w reżimie niskiej bariery i silnych oddziaływań. Wyniki sugerują, że przy stanie początkowym  $|2\rangle$  modele dwumodowe mogą ze znacznie większą dokładnością odtworzyć ścisłą dynamikę, dzięki temu, że układ jest w tych warunkach względnie słabo skorelowany.



## Rozdział 6

# Wnioski i zakończenie

Zbadaliśmy dynamikę układu dwóch ultrazimnych bozonów w podwójnej studni potencjału, porównując wyniki uzyskane w dwumodowych modelach uproszczonych ze ścisłą dynamiką pełnego modelu. Obliczenia przeprowadzono dla różnych wartości parametrów eksperymentalnych, zmieniając głębokość studni, siłę oddziaływań międzycząstkowych oraz stan początkowy układu.

Wyniki potwierdzają, że dokładność modeli dwumodowych zależy od siły korelacji międzycząstkowych w układzie. Gdy dobór parametrów prowadzi do narastania korelacji, modele dwumodowe zawodzą. W szczególności dla płytkich studni potencjału modele te są wystarczające tylko w reżimie słabych oddziaływań. Jednak zwiększanie siły oddziaływań powoduje, że przestają one poprawnie oddawać ścisłą dynamikę.

Okazuje się jednak, że na poprawność modeli wpływ mają także głębokość studni oraz stan początkowy układu. Obecność wysokiej bariery między studniami utrudnia pojawianie się silnych korelacji. Gdy bariera jest wystarczająco wysoka, modele dwumodowe okazują się poprawne nawet dla bardzo silnych oddziaływań.

Stan początkowy układu ma także duże znaczenie. Jeśli oba bozony są początkowo umieszczone w tej samej studni, w reżimie silnych oddziaływań układ wykazuje silne korelacje. Jeśli jednak oba bozony początkowo są w przeciwnych studniach, skorelowanie układu jest zauważalnie słabsze. W drugim przypadku modele dwumodowe są znacznie dokładniejsze niż w pierwszym, nawet w reżimie płytkich studni i silnych oddziaływań.

Rozszerzony model dwumodowy, w którym uwzględniono dodatkowe procesy tunelowania i oddziaływań, ma w pewnych sytuacjach przewagę nad uproszczonym modelem pomijającym dodatkowe człony. Model rozszerzony z dużą dokładnością odtwarza dynamikę populacji studni, bez względu na parametry eksperymentalne. Tymczasem model uproszczony przy silniejszych oddziaływaniach daje mniej dokładne lub nawet całkowicie błędne wyniki. Jednak jeśli chodzi o odtwarzanie korelacji międzycząstkowych, model rozszerzony nie wykazuje znaczącej przewagi nad modelem uproszczonym.

Z przedstawionej pracy wynika także, że chcąc ocenić przydatność danego modelu uproszczonego należy zweryfikować jego przewidywania dla wielu parametrów charakteryzujących stan układu. Na przykład, gdybyśmy w naszej analizie ograniczyli się do dynamiki populacji studni, wówczas przecenilibyśmy dokładność rozszerzonego modelu dwumodowego, który przy wysokości bariery  $b = 3$  i stanie początkowym  $|\text{ini}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_{R0}^\dagger\hat{a}_{R0}^\dagger|\text{vac}\rangle$  dawał wyniki zbliżone do ścisłej dynamiki populacji nawet

przy silnych oddziaływaniach. Dopiero analiza dynamiki innych parametrów ujawniła niedokładność modelu. Z kolei przy stanie początkowym  $|ini\rangle = \hat{a}_{L0}^\dagger \hat{a}_{R0}^\dagger |vac\rangle$  dynamika populacji, jako trywialna, jest dla dowolnych parametrów odtwarzana identycznie przez modele uproszczone, przez co nie można na jej podstawie uzyskać rzetelnej informacji co do dokładności tych modeli.

Omówione w pracy zagadnienie dynamiki dwóch bozonów w jednowymiarowej, podwójnej studni potencjału daje pole do dalszych rozważań. Ponieważ potencjał podwójnej studni można modelować za pomocą różnych funkcji matematycznych, można spróbować zbadać, czy podobne wyniki uzyskane zostałyby dla studni o innym kształcie. Interesująca byłaby także weryfikacja naszych wyników dla liczby bozonów większej niż dwa, a także dla potencjałów z większą niż dwa liczbą studni.

## Rozdział 7

# Literatura

- [1] J. Dobrzyniecki, T. Sowiński: „*Exact dynamics of two ultra-cold bosons confined in a one-dimensional double-well potential*”, EPJ D **70**, 83 (2016).
- [2] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), U. Sen: „*Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*”. Adv. Phys. **56**, 243-379 (2007).
- [3] J. Quintanilla, C. Hooley: „*The strong-correlations puzzle*”. Phys. World **22**, 32 (2009).
- [4] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle: „*Observation of interference between two Bose condensates*”. Science **275**, 637 (1997).
- [5] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, S. R. Shenoy: „*Quantum Coherent Atomic Tunneling between Two Trapped Bose-Einstein Condensates*”. Phys. Rev. Lett. **79**, 4950 (1997).
- [6] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright, D. F. Walls: „*Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential*”. Phys. Rev. A **55**, 4318 (1997).
- [7] C. Menotti, J. R. Anglin, J. I. Cirac, P. Zoller: „*Dynamic splitting of a Bose-Einstein condensate*”. Phys. Rev. A **63**, 023601 (2001).
- [8] F. Meier, W. Zwerger: „*Josephson tunneling between weakly interacting Bose-Einstein condensates*”. Phys. Rev. A **64**, 033610 (2001).
- [9] Y. Shin, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard, A. E. Leanhardt: „*Atom Interferometry with Bose-Einstein Condensates in a Double-Well Potential*”. Phys. Rev. Lett. **92**, 050405 (2004).
- [10] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, M. K. Oberthaler: „*Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction*”. Phys. Rev. Lett. **95**, 010402 (2005).
- [11] S. Levy, E. Lahoud, I. Shomroni, J. Steinhauer: „*The a.c. and d.c. Josephson effects in a Bose-Einstein condensate*”. Nature **449**, 579-583 (2007).

- [12] A. N. Salgueiro, A. F. R. de Toledo Piza, G. B. Lemos, R. Drumond, M. C. Nemes, M. Weidemueller: „*Quantum dynamics of bosons in a double-well potential: Josephson oscillations, self-trapping and ultralong tunneling times*”. Eur. Phys. J. D **44**, 537-540 (2007).
- [13] L. Simon, W. T. Strunz: „*Analytical results for Josephson dynamics of ultracold bosons*”. Phys. Rev. A **86**, 053625 (2012).
- [14] Y. Liu, Y. Zhang: „*Two atoms in a double well: Exact solution with a Bethe ansatz*”. Phys. Rev. A **91**, 053610 (2015).
- [15] V. E. Lashkaryov: „*Investigations of a barrier layer by the thermoprobe method*”, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Fiz. **5**, 442–446 (1941).
- [16] B. D. Josephson: „*Possible new effects in superconductive tunnelling*”. Phys. Lett. **1**, 251 (1962).
- [17] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni, S. R. Shenoy: „*Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects,  $\pi$  oscillations, and macroscopic quantum self-trapping*”. Phys. Rev. A **59**, 620 (1999).
- [18] Elena A. Ostrovskaya, Yuri S. Kivshar, Mietek Lisak, Bjorn Hall, Federica Cattani, Dan Anderson: „*Coupled-mode theory for Bose-Einstein condensates*”. Phys. Rev. A **61**, 031601(R) (2000).
- [19] D. Ananikian, T. Bergeman: „*Gross-Pitaevskii equation for Bose particles in a double-well potential: Two-mode models and beyond*”. Phys. Rev. A **73**, 013604 (2006).
- [20] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, T. Pfau: „*The physics of dipolar bosonic quantum gases*”. Rep. Prog. Phys. **72**, 126401 (2009).
- [21] S. K. Adhikari: „*Self-trapping of a dipolar Bose-Einstein condensate in a double well*”. Phys. Rev. A **89**, 043609 (2014).
- [22] A. de Paz, B. Naylor, J. Huckans, A. Carrance, O. Gorceix, E. Maréchal, P. Pedri, B. Laburthe-Tolra, L. Vernac: „*Dipolar atomic spin ensembles in a double-well potential*”. Phys. Rev. A **90**, 043607 (2014).
- [23] T. Sowiński, M. Brewczyk, M. Gajda, K. Rzążewski: „*Dynamics and decoherence of two cold bosons in a one-dimensional harmonic trap*”, Phys. Rev. A **82**, 053631 (2010).
- [24] S. Dutta, A. Barman, A. Siddharth, A. Khan, S. Basu: „*Tunneling dynamics of correlated bosons in a double well potential*”. Eur. Phys. J. B **88**, 139 (2015).
- [25] V. Jelic, F. Marsiglio: „*The double-well potential in quantum mechanics: a simple, numerically exact formulation*”, Eur. J. Phys. **33**, 1651 (2012).
- [26] L. D. Landau, E. M. Lifshitz: *Mechanika kwantowa: Teoria nierelatywistyczna*, tłum. Ludwik Dobrzyński, Andrzej Pindor. Wydanie drugie zmienione (Warszawa, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, 1979).
- [27] C. J. Pethick, H. Smith: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Second Edition (Cambridge University Press, New York, 2008).

- [28] T. Busch, B.-G. Englert, K. Rzazewski, M. Wilkens: „*Two Cold Atoms in a Harmonic Trap*”, *Found. Phys.* **28**, 549 (1998).
- [29] R. Grobe, K. Rzazewski, J. H. Eberly: „*Measure of electron-electron correlation in atomic physics*”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, L503-508 (1994).
- [30] K. Winkler, G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. Hecker Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler, P. Zoller: „*Repulsively bound atom pairs in an optical lattice*”, *Nature* **441**, 853-856 (2006).