

Daniel Pęczak

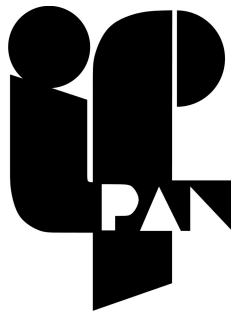
Silnie skorelowane układy kilku ultrazimnych fermionów o różnych masach

Rozprawa doktorska

przygotowana w Instytucie Fizyki

Polskiej Akademii Nauk

pod kierunkiem dra hab. Tomasza Sowińskiego, prof. IF PAN



25 września 2017

*Pracę dedykuję
mojej kochanej żonie Karolinie*

Podziękowania

Chciałbym serdecznie podziękować mojemu Promotorowi dr. hab. Tomaszowi Sowińskiemu za opiekę naukową oraz godziny dyskusji, które przyczyniły się do mojego rozwoju. Jego cenne wskazówki i uwagi dotyczące niniejszej rozprawy znacznie poprawiły jej jakość.

Chciałbym także podziękować pracownikom Zespołu Optyki Kwantowej Instytutu Fizyki PAN za niezliczone rozmowy i tworzenie serdecznej atmosfery, w której mogłem spędzić ostatnie lata i która była niezwykle stymulująca naukowo.

Specjalne podziękowania należą się mojemu przyjacielowi Dominikowi Gronkiewiczowi za godziny rozmów na temat transformaty Fouriera oraz za to, że mogłem się tak wiele od niego nauczyć w kwestii organizacji kodu.

Pragnę także podziękować mojej Rodzinie, na którą, odkąd pamiętam, zawsze mogłem i nadal mogę liczyć. Dzięki Wam znalazłem się w miejscu, w którym w tej chwili jestem.

Spis treści

1	Historia badania zdegenerowanych gazów kwantowych	6
2	Model mieszaniny kilku fermionów	14
2.1	Stany jednociąłowe	16
2.2	Metody numeryczne	19
3	Separacja środka masy	25
3.1	Dwa rozróżnialne atomy	26
3.2	Hamiltonian środka masy	27
3.3	Widmo hamiltonianu	29
3.4	Korelacje dwuciąłowe	35
4	Separacja profilu gęstości indukowana różnicą mas	42
4.1	Własności stanu podstawowego	42
4.2	Własności stanu mieszanego	46
4.3	Jednowymiarowa studnia prostokątna	49
5	Przejście indukowane zmianą kształtu pułapki	52
5.1	Widmo wielociąłowe	55
5.2	Porównanie z układem o tej samej masie	56
5.3	Przejście powodowane zmianą kształtu pułapki	59
6	Ansatz interpolacyjny	65
6.1	Badany układ	66
6.2	Ocena ansatzu interpolacyjnego	68
6.3	Konkluzje	76
	Bibliografia	88

Wstęp

Wszystkie znane nam cząstki można podzielić na dwie bardzo ogólne rodziny: fermiony, z których zbudowana jest materia (np. elektrony, kwarki, miony) i bozony, które przenoszą oddziaływania (fotony, gluony, bozony Z^0 oraz W^\pm). Rodziny te odróżnia tzw. spin, czyli wewnętrzny moment pędu cząstki, nie posiadający swojego odpowiednika w świecie klasycznym. Z twierdzenia o związku spinu ze statystyką wynika [5], że bozony obdarzone są spinem całkowitym ($0\hbar, 1\hbar, 2\hbar, \dots$), a fermiony mają spin połówkowy ($1/2\hbar, 3/2\hbar, \dots$). Własności tych dwóch typów cząstek zasadniczo różnią się od siebie. Wynika to bezpośrednio z faktu, że dwa fermiony, w odróżnieniu od bozonów, nie mogą znajdować się w tym samym stanie kwantowym. Fakt ten, znany jako zakaz Pauliego, jest fundamentem teorii wiązań atomowych i budowy molekuł. Ponieważ bozony nie podlegają zakazowi Pauliego, wiele z nich może znajdować się w tym samym stanie kwantowym. Obserwacja ta jest jedną z podstaw teoretycznych budowy lasera.

Na poziomie fundamentalnym cała materia składa się z fermionów, jednak w naturalnych warunkach tworzą one stabilne cząstki — nukleony. Te zaś, wraz z elektronami tworzą atomy. W zależności od rozważanego izotopu atomu, całkowita liczba wszystkich fermionów w atomie może być parzysta lub nieparzysta. Jeżeli jest nieparzysta, to całkowity spin atomu (suma spinów wszystkich tworzących go fermionów) jest połówkowy i atom traktowany jako całość jest fermionem. Jeśli natomiast liczba fermionów tworzących atom jest parzysta to cały atom ma własności bozonowe. Ta obserwacja oznacza, że w warunkach, w których atomy są stabilne materia może mieć również bozonowe składniki.

Wielkim osiągnięciem technik doświadczalnych końca XX wieku było opracowanie metod przetrzymywania i ochładzania gazów atomowych do temperatur mniejszych niż milionowa część stopnia powyżej zera absolutnego [6, 7]. Dzięki temu możliwe stało się precyzyjne kontrolowanie układów ultrazimnych atomów i badanie ich własności w warunkach, w których objawiają się ich własności kwantowe. Pierwsze otrzymanie w roku 1995 tzw. kondensatu Bosego-Einsteina — stanu materii, w którym makroskopowa liczba bozonów znajduje się w tym samym, energetycznie najniższym, stanie kwantowym, zrewolucjonizowało rozwój fizyki atomowej [8, 9]. Doświadczenia ostatnich lat pokazały, że możliwe jest również schładzanie i badanie różnych mieszanin atomów bozonowych i fermionowych (o tych samych, jak i różnych masach), efektywne wytwarzanie układów dwu- lub jednowymiarowych, a także kontrolowanie

wzajemnego oddziaływania pomiędzy atomami w całym zakresie, tzn. od bardzo mocno odpychającego, poprzez zupełnie nieoddziałujące, aż do silnie przyciągającego. Te doświadczalne możliwości sprawiają, że temat ten jest niezwykle interesujący z punktu widzenia teoretycznego [10, 11]. Możliwe jest bowiem eksperymentalne przygotowywanie układów kwantowych posiadających uwypuklone pożądane cechy.

Dużym wyzwaniem doświadczalnym dla fizyków było przygotowanie ultrazimnego gazu złożonego z dobrze określonej, niewielkiej liczby atomów. Stało się to możliwe dzięki bardzo dokładnemu kontrolowaniu pola magnetycznego oraz profilu wiązki laserowej, za pomocą których modyfikowany jest kształt pułapki, w której uwięzione są atomy. Dostosowując odpowiednio profil pułapki można sprawić, że większość fermionów ją opuści, a zostanie jedynie kilka tych o najmniejszej energii, na których można później prowadzić dalsze eksperymenty [12–18]. W celu dokonania pomiaru, w najnowszych badaniach coraz częściej używane są specjalne detektory, umożliwiające fotografowanie pojedynczych atomów [19–27]. Powyższe zdobycze techniki sprawiają, że można bezpośrednio porównywać zjawiska w badanym układzie kilku silnie oddziałujących fermionów z przewidywaniami modeli teoretycznych.

Z punktu widzenia fizyki teoretycznej układy kilku ciał są bardzo trudne w opisie. Co prawda dla niektórych problemów dwóch ciał w mechanice kwantowej znane są dokładne rozwiązania równania Schrödingera, np. dla atomu wodoru lub dwóch cząstek oddziałujących ze sobą kontaktowo [28]. Jednak nawet klasyczny problem trzech ciał nie posiada w ogólności rozwiązania analitycznego, a opis kwantowomechaniczny posiada dużo większy poziom komplikacji. Warto wspomnieć, że narzucając pewne dodatkowe warunki i korzystając z wyrafinowanych narzędzi matematycznych, można sporadycznie rozwiązać problem kilku ciał [29–38], zwłaszcza jeżeli posiada on pewne symetrie. Z drugiej strony, układy składające się z wielu cząstek można opisywać metodami fizyki statystycznej. Zagadnienia układów kilku, kilkunastu czy kilkudziesięciu ciał, które są za małe, by zastosować techniki statystyczne, lecz są zbyt skomplikowane by uzyskać rozwiązania analityczne wciąż sprawiają pewne trudności. Jednym z pytań w tej dziedzinie, na które próbowano odpowiadać to ile cząstek, to już „wiele” [14, 39, 40].

W szerszym kontekście, zrozumienie jak w układzie silnie oddziałujących cząstek tworzą się korelacje oraz jak zależą one od parametrów układu (liczby cząstek, ich statystyki, mas poszczególnych składników, oddziaływań pomiędzy nimi, etc.) może pomóc zrozumieć mechanizmy takich zjawisk makroskopowych zachodzących w silnie skorelowanych układach jak występowanie magnetyzmu czy nadprzewodnictwo, których pewne aspekty pozostają zagadką do dnia dzisiejszego.

Obecnie prowadzone są doświadczenia, w których badane są dwuskładnikowe układy kilku fermionów o tej samej masie. Z drugiej strony następuje intensywna eksploracja mieszanin fermionowych, w których obydwie składniki składają się z różnych pierwiastków, lecz każdy z nich ma własności fermionowe. Precyzyjne kontrolowanie małych układów jest bardzo trudne i w tej

chwili nie istnieją doświadczenia oparte na mieszaninie pierwiastków o różnych masach. Jednak wydaje się tylko kwestią czasu opracowanie metod pozwalających na połączenie dwóch wyżej wymienionych kierunków badań i uzyskanie układów kilku ultrazimnych fermionów o różnych masach. W ostatnich latach były podejmowane próby analizy teoretycznej takich układów, lecz kompleksowe badania nie były do tej pory wykonane. W następnych rozdziałach zostanie pokazane, że własności układów kilku ultrazimnych fermionów o różnych masach wykazują nie tylko ilościowe, ale jakościowe różnice prowadzące do zupełnie nowych zjawisk. Celem niniejszej rozprawy jest pokazanie, że różnica mas w dwuskładnikowej mieszaninie ultrazimnych fermionów zasadniczo zmienia właściwości układu.

Struktura pracy

Pierwszy rozdział jest poświęcony wprowadzeniu w tematykę ultrazimnych atomów. Przedstawiona historia zagadnienia przetrzymywania i chłodzenia gazów atomowych zarysowuje szerszy kontekst, w którym należy umieścić wyniki tejże rozprawy. Omówione są także osiągnięcia ostatnich lat, zarówno teoretyczne jak i doświadczalne.

W rozdziale drugim wprowadzony zostaje model dwuskładnikowej mieszaniny fermionów, który jest badany w rozprawie. Ta konkretna postać modelu jest motywowana eksperymentami w dziedzinie układów kilku ciał. Następnie są opisane metody numeryczne, w szczególności metoda ścisłej diagonalizacji hamiltonianu, dzięki której uzyskano wyniki opisane w pracy.

Rozdział trzeci jest poświęcony ogólnym własnościom układów kilku oddziałujących ciał. Omówione w nim zostanie wielociałowe widmo energetyczne mieszaniny fermionów w układzie środka masy oraz w układzie laboratoryjnym. Na przykładzie dwuciałowej funkcji korelacji zostanie pokazane, że ta funkcja może zawierać informację istotną z punktu widzenia doświadczeń nad ultrazimnymi gazami.

Rozdział czwarty dotyczy zjawiska separacji profilu gęstości jednego ze składników obserwowanego w mieszaninie dwóch rodzajów fermionów umieszczonych w zewnętrznym potencjale. Analizowany jest zarówno przypadek zewnętrznego potencjału harmonicznego jak i studni prostokątnej. Separacja zachodzi tylko wtedy, gdy atomy dwóch odpychających się składników mają różne masy i w ogólności nie jest obserwowana w układach posiadających atomy o tej samej masie. Zbadany zostanie nie tylko stan podstawowy układu, ale także stan termiczny, co pozwoli na odniesienie zaobserwowanego zjawiska do realiów eksperymentalnych.

W rozdziale piątym jest opisany mechanizm zmiany charakteru separacji profilu gęstości cząstek w przypadku adiabaticznego przełączenia kształtu zewnętrznego potencjału ze studni prostokątnej do potencjału oscylatora harmonicznego. Zaobserwowane nietypowe przejście między różnymi rodzajami separacji przestrzennej zostanie opisane za pomocą metod wykorzystywanych w teorii przejść kwantowych.

Rozdział szósty jest poświęcony dokładnemu badaniu szczególnego przypadku układu złożonego z czterech cząstek (dwóch cząstek jednego typu oraz dwóch innego). Ilościowo zweryfikowana zostanie dokładność metody wariacyjnej zaproponowanej w [41] przez porównanie wyników uzyskanych za jej pomocą z dokładnymi wynikami otrzymanymi za pomocą metody ścisłej diagonalizacji. Ocenie poddane zostaną obserwabla takie jak: profil gęstości jednociągowej, korelacje dwuciałowe oraz obsadzenia.

Opisane w rozprawie wyniki zostały opublikowane w następujących pracach:

- **D. Pęczak**, M. Gajda, T. Sowiński
„Two-flavor mixture of a few fermions of different mass in a one-dimensional harmonic trap”
New J. Phys. **18**, 013030 (2016),
- **D. Pęczak**, T. Sowiński
„Few strongly interacting ultracold fermions in one-dimensional traps of different shapes”
Physical Review A **94**, 042118 (2016),
- **D. Pęczak**, A. S. Dehkharghani, N. T. Zinner, T. Sowiński
„Four fermions in a one-dimensional harmonic trap: Accuracy of a variational-ansatz approach”
Physical Review A **95**, 053632 (2017).

Ponadto jedna praca została opublikowana w postaci pre-rintu:

- **D. Pęczak**, M. Gajda, T. Sowiński
„Experimentally accessible invariants encoded in interparticle correlations of harmonically trapped ultra-cold few-fermion mixtures”
arXiv:1703.08116 (2017).

Rozdział 1

Historia badania zdegenerowanych gazów kwantowych

W 1911 roku krakowski fizyk Władysław Natanson wprowadził koncepcję nierozróżnialnych, identycznych cząstek. Rozkład ich energii kinetycznych nie podlegał rozkładowi Boltzmann'a, lecz rozkładowi znanemu dzisiaj jako rozkład Bosego-Einsteina. Koncept ten został użyty do opisu przyrody oraz rozwinięty ponownie niemal dekadę po tym jak tego dokonał Władysław Natanson. W 1924 roku Satyendra Nath Bose poprosił słynnego już wówczas Alberta Einsteina o przetłumaczenie jego artykułu pt. „*Planck's Law and Light Quantum Hypothesis*”. Zainspirowany artykułem Albert Einstein opisał kwantowy gaz nieoddziałujących i nierozróżnialnych cząstek w „*Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*”. W pracy tej przewidział, że w odpowiednio niskich temperaturach bozony (cząstki o spinie całkowitym) będą makroskopowo obsadzać najniższy dostępny stan energetyczny układu. Fakt istnienia przejścia fazowego w nieoddziałującym układzie bozonów był bardzo długo traktowany jako ciekawostka teoretyczna nie mająca nic wspólnego z doświadczeniem. W latach 20-tych XX wieku nie były bowiem znane jeszcze układy, w których można zaobserwować nowe zjawisko nazwane kondensatem Bosego-Einsteina.

Okres powyższych odkryć teoretycznych przypadł na czas po tym jak w 1908 roku Heike Kamerlingh Onnes skroplił jako pierwszy na świecie hel. Następnie korzystając z ciekłego helu, chłodził za jego pomocą inne materiały do temperatur rzędu 1.5 K, co pozwoliło mu na odkrycie nadprzewodnictwa pierwszego rodzaju trzy lata później. Mimo dostępu do najniższych na tamte czasy temperatur na świecie, układy o temperaturach skroplonego helu nie umożliwiały zademonstrowania kondensacji Bosego-Einsteina. Minęło 70 lat, aby teoretyczne przewidywanie zostało potwierdzone doświadczalnie w dwóch niezależnych grupach pracujących nad ultrazimnymi gazami atomowymi w temperaturach przeszło milion razy niższych od temperatury ciekłego helu. Za doświadczalne wytworzenie kondensatu Bosego-Einsteina Eric Cornell, Carl Wieman oraz Wolfgang Ketterle otrzymali w 2001 roku nagrodę Nobla.

W sposób naturalny pojawia się pytanie, jaki jest związek między ultrazimnymi gazami, a bozonami oraz fermionami występującymi w przyrodzie, które znamy jako niepodzielne cząstki elementarne. W zasadzie, w warunkach ziemskich te ostatnie nie występują jako swobodne cząstki, lecz tworzą stabilne struktury: atomy. Atom jako całość może zawierać parzystą bądź nieparzystą liczbę fermionów, będącą sumą składających się nań neutronów, protonów oraz elektronów. Całkowity spin atomu jest więc całkowity (parzysta liczba fermionów) lub półowkowy (nieparzysta liczba fermionów), a to znaczy, że atom może być traktowany odpowiednio jako złożony bozon lub fermion. Ta własność pozwala opisywać odpowiednie izotopy pierwiastków za pomocą statystyki Bosego-Einsteina lub Fermiego-Diraca i jest podstawą eksperymentów wykonywanych na ultrazimnych atomach.

Badanie ultrazimnych gazów nie byłoby możliwe bez niesamowitego postępu w dziedzinie pułapkowania i chłodzenia atomów [6, 7], za które w 1997 roku została przyznana nagroda Nobla. Materialne pojemniki (np. komora próżniowa) mają tę wadę, że ich ściany wykonują drgania cieplne, które przekazują energię atomom. Aby odizolować badany układ termicznie, powstaje potrzeba zaprojektowania zewnętrznych potencjałów, ograniczających ruch atomów. Już w 1842 roku brytyjski matematyk Samuel Earnshaw zauważył, że w pustej przestrzeni nie istnieje statyczna kombinacja pól elektrycznych, magnetycznych oraz grawitacyjnych, dla której energia potencjalna miałaby lokalne minimum. Twierdzenie Earnshawa niewątpliwie stanowi problem w zaprojektowaniu pól przetrzymujących atomy. Może on jednak zostać rozwiązany przy pomocy pól zmieniających się w czasie.

Ważną historycznie realizacją tego pomysłu jest pułapka Paula, która służy do przetrzymywania jonów. Obdarzony ładunkiem jon jest umieszczony w kwadrupolowym polu elektrycznym wytwarzanym przez elektrody. Potencjał elektryczny takiego układu ma kształt siodła, więc w jednym kierunku będzie ograniczał ruch cząstek (tzw. kierunek wiążący), ale w prostopadłym do niego kierunku cząstki mogą opuścić pułapkę (tzw. kierunek antywiązący), co jest niepożądane. Zmieniając napięcie na elektrodach można sprawić, że kierunki wiążący i antywiązący będą się zmieniać. Przy odpowiednio dobranej częstości zmian jon umieszczony w takim polu nie opuści pułapki. Wolfgang Paul wraz z Hansem Dehmelmtem zostali uhonorowani nagrodą Nobla w 1989 roku za wkład w rozwój technik przetrzymywania jonów.

W doświadczeniach nad zimnymi gazami atomy są zwykle neutralne, więc zamiast pułapki Paula używa się tzw. pułapki dipolowej. Zmiennymi w czasie polami są pola laserowe o częstościach dobranych odpowiednio do przejść konkretnych atomów użytych w doświadczeniu. Jeżeli częstotliwość światła laserowego jest mniejsza niż pewne wybrane przejście atomowe (mówimy o odstrojeniu ku czerwieni, ang. *red detuning*), to atom jest przyciągany do miejsc, w którym natężenie światła laserowego jest większe. Natomiast dla częstości światła większej od przejścia atomowego (odstrojenie ku niebieskiemu, ang. *blue detuning*) atomy są wypychane z regionów o wysokim natężeniu światła laserowego. Dobierając odpowiednio częstości oraz

ułożenie laserów, możliwe jest uzyskanie efektywnego potencjału, w którego minimach będą się znajdować atomy.

Aby cząstki pozostały w minimach potencjału, muszą mieć odpowiednio niską energię. W tym celu atomy zwykle trzeba poddać chłodzeniu, tak by ich energia kinetyczna była co najwyżej tego samego rzędu co ich energia potencjalna w pułapce dipolowej. Jedną z częściej stosowanych metod chłodzenia jest tzw. chłodzenie dopplerowskie polegające na wielu procesach absorpcji i emisji fotonu przez atomy podlegające chłodzeniu. Mechanizm chłodzenia jest oparty na obserwacji, że w układzie odniesienia poruszającego się atomu, na skutek zjawiska Dopplera, światło laserowe ma inną częstotliwość, niż w układzie laboratoryjnym. Można tak dobrać parametry układu doświadczalnego, żeby atomy poruszające się były zawsze w rezonansie z falą świetlną w swoim układzie odniesienia. Absorpcja fotonu będzie powodować wzbudzenie atomu oraz wytracenie jego pędu wzdłuż kierunku wiązki laserowej. Stan wzbudzony nie jest stanem trwałym, więc po pewnym czasie atom emituje foton i przechodzi do stanu podstawowego. W układzie związanym z laboratorium foton wyemitowany ma większą energię niż foton absorbowany, zmniejsza więc energię kinetyczną atomu. Emisja fotonu jest spontaniczna i występuje w losowym kierunku, więc po wielu takich procesach średni pęd atomu wynikający z emisji fotonu będzie się zmniejszał. Fluktuacje średniego pędu nakładają ograniczenia na minimalną temperaturę, którą można osiągnąć za pomocą chłodzenia dopplerowskiego.

Aby pokonać tę granicę i schłodzić atomy do jeszcze niższych temperatur, powszechnie stosuje się modyfikacje pułapki dipolowej [42] oraz tzw. schładzanie przez odparowanie. Metoda ta polega na usuwaniu ze zbioru atomów tych, które mają najwyższą energię. Rozkład pędów cząstek w układzie w stanie równowagi termodynamicznej jest opisywany za pomocą pewnego rozkładu. Wybiórcze usunięcie grupy najszybszych atomów powoduje zmianę rozkładu pędów cząstek. Z czasem, dzięki zderzeniom między atomami i powrotowi do równowagi termicznej, przywracany jest rozkład równowagowy, opisujący rozkład cząstek o niższej temperaturze. W procesie chłodzenia przez odparowanie średnia energia układu przypadająca na jedną cząstkę spada przy jednoczesnym zmniejszaniu się całkowitej liczby cząstek w pułapce dipolowej. Obniżając głębokość zewnętrznego potencjału można wymuszać usuwanie atomów o coraz mniejszej energii. Ostatecznie otrzymujemy ułamek początkowej liczby atomów o bardzo niskiej temperaturze, rzędu 10 nK.

W tak niskich temperaturach (i ciśnieniach, które występują na Ziemi) wszystkie znane pierwiastki znajdują się w fazie stałej (wyjątkiem jest hel, który w takich warunkach jest ciekły). Do doświadczeń nad ultrazimnymi gazami używa się najczęściej atomów pierwiastków, które w tych temperaturach powinny być ciałami stałymi. Aby dowiedzieć się dlaczego tak się dzieje, przyjrzyjmy się mechanizmowi resublimacji. Z zasady zachowania pędu oraz energii wynika, że podczas zderzenia dwóch atomów dochodzi między nimi do wymiany pędów. Jeżeli dwa atomy nie stanowiły układu związanego przed zderzeniem, nie zmieni się to także w wyniku zderze-

nia. Dopiero w wyniku oddziaływania trzech atomów może się zdarzyć, że dwa z nich utworzą stan związany, a trzeci atom uniesie nadwyżkę energii i pędu z układu. Kolejne zderzenia mogą prowadzić do utworzenia wielociałowych stanów związanych. Oba procesy, tzn. formowanie cząsteczek (stanów związanych atomów) oraz pojawianie się atomów z dużą energią, oznaczają straty atomów przydatnych z punktu widzenia doświadczenia. Procesy związane z resublimacją są bardzo złożone i zależą od wielu parametrów ultrazimnego gazu (np. od jego gęstości). Parametry te można jednak tak dobrać, że skale czasowe resublimacji i innych procesów niszczących ultrazimny układ atomów są dużo dłuższe niż skale czasowe charakteryzujące dynamikę oraz procesy optyczne, które są badane w układach atomowych. W ten sposób można otrzymać kondensat Bosego-Einsteina lub zdegenerowany gaz Fermiego, które składają się z atomów w stanie metatrwałym.

Początkowo doświadczenia nad ultrazimnymi układami wykonywano w taki sposób, że każdy wymiar przestrzenny był jednakowo ważny. Z czasem zaczęto badać własności gazów atomowych w układach niskowymiarowych. Sama idea tworzenia struktur niskowymiarowych w doświadczeniach z ultrazimnymi gazami jest bardzo prosta. Aby uzyskać układ quasi-dwuwymiarowy należy tak zdeformować pułapkę, w której są przetrzymywane atomy, żeby ich ruch mógł odbywać się tylko w płaszczyźnie. Analogicznie można zmniejszyć rozmiary poprzeczne pułapki w dwóch kierunkach i tym samym utworzyć układ quasi-jednowymiarowy. Deformacja pułapki wiąże się ze zmianą skali energii, tzn. im węższa pułapka, tym więcej energii jest potrzebne do wzbudzenia układu w danym kierunku. To tłumaczy dlaczego preferowany jest ruch w płaszczyźnie lub wzdłuż wyróżnionej prostej w przypadku obniżonej wymiarowości układu.

Układy jedno- oraz dwuwymiarowe są ważne, ponieważ w układach niskowymiarowych mogą występować zupełnie inne zjawiska niż w standardowych układach trójwymiarowych. Bardzo ważnym przykładem w kontekście zimnych gazów atomowych jest przejście fazowe Bosego-Einsteina, które w przypadku braku potencjału zewnętrznego zachodzi w trzech wymiarach, ale już nie zachodzi w dwóch czy jednym wymiarze. Jest to znany fakt teoretyczny, ale został pokazany doświadczalnie dopiero w eksperymencie przeprowadzonym w Cambridge w grupie Zorana Hadzibabica [43]. Przykładem zjawiska, które występuje w układach dwuwymiarowych jest kwantowy efekt Halla, za którego odkrycie Klausowi von Klitzingowi została przyznana nagroda Nobla w 1985. Innym przykładem zjawiska zachodzącego w dwóch wymiarach jest tzw. przejście fazowe Berezinskiego-Kosterlitz-Thoulessa zachodzące w modelu XY, które jest przykładem tzw. przejścia topologicznego. Opisanie przejść topologicznych zostało uhonorowane nagrodą Nobla w 2016 roku.

W tym miejscu warto wspomnieć o pracy Tonksa [44], w której zostały wyprowadzone równania stanu gazu twardych kul w różnej liczbie wymiarów przestrzennych. W 1960 roku Marvin Girardeau postulował [45], że jednowymiarowy układ bozonów odpychających się nieskończenie silnie ma identyczne widmo energetyczne oraz profil gęstości jak nieoddziałujący gaz fer-

mionów. W literaturze tego typu korespondencja między własnościami bozonów oraz fermionów jest nazywana fermionizacją bozonów. Jednowymiarowy układ silnie oddziałujących bozonów (nazywany gazem Tonksa-Girardeau) został wytworzony eksperymentalnie w 2004 roku w grupach Immanuela Blocha [46] oraz Davida Weissa [47].

Oczywiście oddziaływania w układach pełnią kluczową rolę. Nie tylko wprowadzają mechanizmy ważne z punktu widzenia przeprowadzania eksperymentu (takie jak termalizacja), ale także są ciekawym tematem do badań same w sobie. W modelach teoretycznych dołączenie do hamiltonianu członu odpowiedzialnego za oddziaływanie najczęściej skutkuje znaczną komplikacją modelu. Szczęśliwie się składa, że oddziaływanie ultrazimnych atomów w granicy niskich energii jest doskonale przybliżone prostym w swej formie dwuciałowym oddziaływaniem kontaktowym postaci [10]:

$$V(\vec{x}, \vec{y}) = g_{3D} \delta_3(\vec{x} - \vec{y}), \quad (1.1)$$

gdzie parametr g_{3D} opisuje siłę oddziaływania, a δ_3 to delta Diraca¹. Postać potencjału (1.1) odzwierciedla fakt, że w rozrzedzonym gazie atomowym odległości między cząstkami są dużo większe niż rozmiary samych cząstek. W związku z tym oddziaływanie kontaktowe można przybliżyć oddziaływaniem, które występuje jedynie jeżeli cząstki są w tym samym punkcie przestrzeni. Siła oddziaływania g_{3D} jest bezpośrednio związana z trójwymiarową długością rozpraszania a_{3D} . Tę ostatnią wielkość z kolei można wyznaczyć z teorii rozpraszania. Stosując przybliżenie Borna i rozkładając falę rozproszoną na fale parcjalne można pokazać, że dominującym wkładem do rozproszenia jest symetryczna fala s , a wyższe fale parcjalne można pominąć, gdy rozważamy zderzenia atomów o niskich pędach. Co więcej, jeżeli rozważamy fermiony, których funkcja falowa jest z natury antysymetryczna ze względu na zamianę cząstek, to wkład od fali s jest równy zero. To oznacza, że w tym przybliżeniu dwa nierozróżnialne fermiony nie będą ze sobą oddziaływać. W tym miejscu warto zauważyć, że jeżeli zderzają się ze sobą dwa fermiony różniące się pewną liczbą kwantową (np. wartością rzutu spinu), to mogą one oddziaływać ze sobą w fali s , ponieważ ze względu na rozróżnialność ich funkcja falowa nie musi spełniać dodatkowych warunków (symetrii lub antysymetrii).

Pełna teoria rozpraszania jest trójwymiarowa. Możliwe jest jednak wyprowadzenie zależności między siłą oddziaływania, a długością rozpraszania w sytuacji, gdy ruch zostaje ograniczony do niższej liczby wymiarów [48]. Oddziaływanie kontaktowe w quasi-jednowymiarowych układach:

$$V(x, y) = g_{1D} \delta(x - y) \quad (1.2)$$

¹Tak naprawdę z powodów formalnych w wyższych wymiarach należy używać zregulowanego operatora: $\delta_3(\mathbf{r})(\partial/\partial\mathbf{r})\mathbf{r}$.

można opisać za pomocą jednej stałej sprzężenia:

$$g_{1D} = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1D}}, \quad (1.3)$$

gdzie m jest masą rozpraszanych atomów, a \hbar jest stałą Plancka podzieloną przez 2π . Jednowymiarową, efektywną stałą rozpraszania a_{1D} można powiązać z trójwymiarową długością rozpraszania a_{3D} oraz z charakterystycznym poprzecznym rozmiarem wydłużonej pułapki a_{\perp} za pomocą wyrażenia [48]:

$$a_{1D} = -\frac{a_{\perp}^2}{2a_{3D}} \left(1 - C \frac{a_{3D}}{a_{\perp}} \right), \quad (1.4)$$

gdzie stała C jest granicą następującego ciągu:

$$C = \lim_{s \rightarrow \infty} \left(\int_0^s \frac{dx}{\sqrt{x}} - \sum_{x=1}^s \frac{1}{\sqrt{x}} \right) = 1.4603\dots$$

Zaletą jednowymiarowego potencjału kontaktowego (1.2) jest to, że jest operatorem samo-sprężonym i można się nim posługiwać bez stosowania procedury regularyzacji, która jest niezbędna w przypadku rozważania potencjału kontaktowego w wyższych wymiarach [28, 49, 50].

Analizując wzory (1.3) oraz (1.4) można zauważyć, że zmieniając rozmiary poprzeczne pułapki a_{\perp} można kontrolować siłę oddziaływania g_{1D} . Nie jest to jednak jedyny sposób, ponieważ istnieje jeszcze inny mechanizm kontroli oddziaływania oparty na zjawisku rezonansu Feshbacha [51]. W zjawisku tym kluczowe jest istnienie struktury wewnętrznej atomów rozpraszanych. Aby to zilustrować, rozważmy dla uproszczenia dwa oddziałujące ze sobą atomy dwupoziomowe. Charakter oddziaływania między atomami jest taki, że w bliskich odległościach atomy tworzą stany związane, natomiast daleko od siebie atomy te nie oddziałują i posiadają jedynie energię związaną z ich strukturą wewnętrzną. W zależności od tego czy oddalone atomy są w stanie podstawowym czy w stanie wzbudzonym, w ogólności energia oddziaływania jest inna. W literaturze mówi się odpowiednio o tzw. kanale otwartym oraz kanałach zamkniętych. Energia kanału otwartego w granicy dużych odległości między atomami znajduje się poniżej energii kanałów zamkniętych. W odpowiednich warunkach może tak się zdarzyć, że energia zderzających się ze sobą atomów w kanale otwartym jest porównywalna z energią stanów związanych w jakimś kanale zamkniętym. Obecność stanów własnych w kanałach zamkniętych wpływa na wartość długości rozpraszania, która zależy od konkretnych energii stanów związanych. Używając zewnętrznych pól (na przykład pola magnetycznego lub elektrycznego) można zmienić względną energię stanów w kanale otwartym oraz w kanałach zamkniętych. To z kolei oznacza, że można wpływać na długość rozpraszania a_{3D} , a tym samym na siłę oddziaływania, co jest niesamowicie użyteczne w doświadczeniach nad ultrazimnymi gazami. W niektórych układach można kontrolować wartość oddziaływań w szerokim zakresie: od bardzo silnego odpy-

chania [46, 47], poprzez brak oddziaływania, do silnego przyciągania [52]. Warto podkreślić, że rezonans Feshbacha występuje zarówno między atomami tych samych pierwiastków [53, 54], jak i w mieszaninach różnych pierwiastków [55, 56].

To właśnie oddziaływanie, a dokładniej jego brak, było jednym z powodów, dla którego chłodzenie fermionów napotkało trudności. Brak oddziaływania oznacza, że nie istnieją mechanizmy odpowiedzialne za termalizację, co uniemożliwia chłodzenie przez parowanie. Sposobem na obejście tego problemu jest technika współchłodzenia (ang. *sympathetic cooling*), która polega na chłodzeniu mieszaniny zawierającej dwa różne składniki. Atomy pochodzące od takich składników są rozróżnialne, więc mogą oddziaływać ze sobą kontaktowo. Dzięki temu można chłodzić układ fermionów oddziałujących na przykład z gazem bozonowym. Obecność gazu bozonowego wprowadza mechanizm zderzeń fermionów z bozonami, czyli możliwość termalizacji. Innym sposobem realizacji chłodzenia fermionów jest użycie mieszaniny dwóch składników fermionowych, które różnią się pewną liczbą kwantową, np. rzutem całkowitego spinu atomu. Właśnie w tego typu układzie mieszaniny dwóch fermionowych izotopów potasu ^{40}K grupa Deborah Jin otrzymała w 2004 roku pierwszy na świecie kondensat fermionowy [57]. Mechanizm kondensacji w tym doświadczeniu jest podobny do mechanizmu powstawania nadprzewodnictwa pierwszego rodzaju. Mianowicie w układzie tworzą się silne korelacje między parą rozróżnialnych fermionów. Pary te, nazwane parami Coopera, posiadają charakter bozonowy, zatem w niskich temperaturach mogą makroskopowo obsadzić wyróżniony orbital dwuciałowy doprowadzając tym samym do stworzenia kondensatu.

Udoskonalenie technik chłodzenia pozwoliło z biegiem lat na znaczne zwiększenie liczby ultrazimnych atomów, które można przygotować w eksperymentach. Z czasem jednak podjęto próby precyzyjnej kontroli mniejszej liczby badanych cząstek. Na przykład w doświadczeniach nad gazem Tonksa-Girardeau [46, 47] liczba atomów w pojedynczej quasi-jednowymiarowej pułapce wahała się od około 20 do 270. Kolejnym krokiem w zmniejszeniu tej liczby były pionierskie doświadczenia nad układami *kilku* ultrazimnych fermionów w jednym wymiarze wykonane w grupie Selima Jochima w Heidelbergu [12–14]. W tego typu eksperymentach badane są dwa stany nadsubtelne litu, które można traktować jak dwa rozróżnialne typy fermionów. Wynika to z faktu, że w praktyce mechanizmy mogące zmienić jeden typ fermionu na drugi są nieistotne. W tych doświadczeniach po wstępnym schłodzeniu fermionów włączany jest dodatkowy potencjał głębokiej mikropułapki. W następnym kroku, manipulując kształtem zewnętrznych potencjałów, można usunąć niepotrzebne atomy, zostawiając tylko kilka, które stanowią obiekt dalszych badań. Dzięki tej procedurze, liczba atomów jest znana z bardzo dużą dokładnością [12]. Oddziaływanie między dwoma różnymi typami fermionów jest precyzyjnie kontrolowane dzięki zjawisku rezonansu Feshbacha za pomocą pola magnetycznego. W szczególności można doprowadzić do tzw. fermionizacji rozróżnialnych fermionów. Oznacza to, że układ silnie odpychających się fermionów dwóch rodzajów będzie miał w stanie podstawowym iden-

tyczny profil gęstości jak nieoddziałujący układ fermionów jednego rodzaju [13]. Dzięki precyzyjnej kontroli liczby cząstek w układzie, można było doświadczalnie wyznaczyć jak zmieniają się własności układu od liczby tworzących go cząstek. W tym celu zaczynając od jednego fermionu, umieszczano w tej samej pułapce pojedynczo fermiony drugiego typu, sprawdzając kiedy w układzie pojawiają się efekty wielociałowe [14]. Warto zaznaczyć, że są znane w literaturze także eksperymenty badające oddziaływanie kilku bozonów, których realizacja jest oparta na wykorzystaniu tzw. pęsety optycznej [18].

Doświadczeniom nad układami kilku ciał towarzyszy prężny rozwój badań teoretycznych w tej dziedzinie [58, 59]. Nowe eksperymenty o niezwykle wysokiej precyzji wymagają od fizyków teoretyków przewidywać równie dokładnych. Z tego powodu wcześniejsze, zgrubne przybliżenia i oszacowania własności kilku ciał kwantowych są stale weryfikowane i poprawiane [12–18]. Fizyka kilku ciał jest trudna do analizy, a wynika to z prostej obserwacji, że 'kilka' atomów to jest za dużo, aby używać metod dobrych do opisu jednego lub dwóch ciał. Jednocześnie 'kilka' to wciąż za mało, aby używać technik statystycznych z teorii wielociałowej oraz opisu pola średniego [58, 60, 61]. Mimo trudności związanych z tą tematyką, znane są własności widm energetycznych dwuskładnikowej mieszaniny fermionów o równej masie [62, 63]. W granicy braku ($g_{1D} = 0$) lub nieskończonych ($g_{1D} = \infty$) oddziaływań problem kilku ciał może zostać rozwiązany półanalitycznie dla fermionów oraz dla bozonów [39, 64–67]. Zapowiedzią ciekawych zjawisk w układzie o różnych masach może być praca [68] opisująca separację profili gęstości w dwuskładnikowej mieszaninie fermionów bez zewnętrznego potencjału. Nawet mieszaniny fermionów o równych masach w granicy silnego oddziaływania wykazują interesujące własności [69], które objawiają się w postaci rozdzielania cząstek przetrzymywanych w zewnętrznej pułapce na dwie grupy. W niniejszej rozprawie postaram się zaprezentować wyniki uzupełniające znane fakty na temat mieszanin fermionów o różnych masach.

Rozdział 2

Model mieszany kilku fermionów

Niniejsza rozprawa opiera się na analizie modelu mieszany dwóch rodzajów ultrazimnych fermionów. Rozważmy przestrzennie jednowymiarowy układ dwóch typów fermionów umieszczonych w pewnym zewnętrznym potencjale. Dwa rozróżnialne typy fermionów będziemy oznaczać pewną liczbą kwantową $\sigma \in \{\downarrow, \uparrow\}$. Liczba kwantowa σ niekoniecznie musi opisywać cząstki różniące się rzutem spinu. W zasadzie cząstki nie muszą wcale posiadać spinowego stopnia swobody. Zakładamy, że liczba kwantowa σ jest zachowana i nie jest zmienną dynamiczną. Doświadczalnie sytuację taką można realizować wybierając na przykład odpowiedni stan nadsubtelny atomu [14]. Wtedy mamy do czynienia z dwoma fermionami o tej samej masie. Alternatywnie można użyć dwóch różnych pierwiastków: na przykład litu i potasu [55, 56], dla których stosunek mas wynosi $m_K/m_{Li} \approx 40/6$. W takim wypadku badana mieszanina składa się z dwóch rodzajów fermionów o różnych masach. W tym miejscu należy zwrócić uwagę, że układy kilku ciał zostały zrealizowane do tej pory jedynie w układach fermionów o tych samych masach, natomiast w doświadczeniach z różnymi pierwiastkami są badane układy o bardzo dużej liczbie cząstek.

Oddziaływania między cząstkami różnych typów modelujemy oddziaływaniem kontaktowym typu δ [10], proporcjonalnym do parametru g_{1D} . Jak było omówione wcześniej, taki model oddziaływania jest całkowicie usprawiedliwiony w reżimie ultraniskich temperatur. W tym przybliżeniu oddziaływanie kontaktowe między fermionami tego samego typu znika z powodu zakazu Pauliego. Hamiltonian układu ma postać:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\downarrow}} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_{\downarrow}(x_i) \right] + \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\uparrow}} \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + V_{\uparrow}(y_j) \right] + g_{1D} \sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} \delta(x_i - y_j), \quad (2.1)$$

gdzie $N_{\downarrow}, N_{\uparrow}$ są liczbami fermionów odpowiednio o masie m_{\downarrow} oraz m_{\uparrow} . $V_{\sigma}(z)$ jest zewnętrznym potencjałem, który może się różnić dla poszczególnych typów fermionów. Efektywny, jednowymiarowy parametr sprzężenia g_{1D} może być wyznaczony z pełnej trójwymiarowej teorii roz-

praszania, jak zostało to pokazane w [48]. Fakt, że sprzężenie g_{1D} może być zmieniane w doświadczeniu przykładowo za pomocą zmiany indukcji pola magnetycznego [55, 56], jest bardzo wygodny z punktu widzenia rozważań teoretycznych i badania hamiltonianu (2.1). Dzięki doświadczalnej swobodzie ustalenia oddziaływania odpychającego, przyciągającego lub jego całkowitego wyłączenia, w zasadzie możliwa jest eksperymentalna weryfikacja całej rodziny modeli teoretycznych. Hamiltonian układu (2.1) jest przemienny z operatorami liczby cząstek w poszczególnych składnikach, $[\hat{H}, \hat{N}_\uparrow] = [\hat{H}, \hat{N}_\downarrow] = 0$, co oznacza, że liczba cząstek każdego rodzaju jest zachowana i fermiony nie mogą zmieniać swojego typu. W mieszaninie atomów o tej samej masie, w której używa się dwóch stanów nadsubtelnych, kanały oddziaływania, które zmieniają liczbę kwantową σ są praktycznie zablokowane. Innymi słowy, aby cząstka z jednego stanu zmieniła się w drugi musiałby się zmienić rzut spinu jądra, a takie procesy nie są możliwe w zderzeniach ultrazimnych gazów. W układach z różnicą mas między składnikami istnieje dodatkowa reguła nadwyboru, która pochodzi z zasady zachowania masy i zabrania ona zamiany atomów jednego rodzaju w drugi.

Forma hamiltonianu zapisanego w formie (2.1) nie jest wygodna do dalszej analizy numerycznej. Dlatego posłużymy się równoważną reprezentacją drugiej kwantyzacji:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int dx \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) H_{\sigma}(x) \hat{\Psi}_{\sigma}(x) + g_{1D} \int dx \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x) \hat{\Psi}_{\downarrow}(x) \hat{\Psi}_{\uparrow}(x), \quad (2.2)$$

gdzie operator pola $\hat{\Psi}_{\sigma}(x)$ anihiluje cząstkę typu σ w punkcie x , a odpowiednie jednociąłowe operatory różniczkowe $H_{\sigma}(x)$ są zdefiniowane jako:

$$H_{\downarrow}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_{\downarrow}} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\downarrow}(x), \quad (2.3a)$$

$$H_{\uparrow}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_{\uparrow}} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\uparrow}(x). \quad (2.3b)$$

Dla nierozróżnialnych fermionów tego samego rodzaju zachodzą relacje antyprzemienności $\{\hat{\Psi}_{\sigma}(x), \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x')\} = \delta(x - x')$ oraz $\{\hat{\Psi}_{\sigma}(x), \hat{\Psi}_{\sigma}(x')\} = 0$. Dla cząstek różnego typu wybór relacji przemienności nie jest jednoznaczny, ponieważ fizyczne wyniki nie zależą od tego wyboru (tak długo jak relacje są używane konsekwentnie) [5]. Warto zwrócić uwagę, że drugi człon w równaniu (2.2) odpowiadający oddziaływaniom dwuciąłowym posiada tak prostą formę (w postaci pojedynczej całki) dzięki temu, że rozważamy oddziaływania kontaktowe postaci (1.2).

Aby doprowadzić hamiltonian (2.2) do dogodnej formy, rozwiniemy operatory pola w pełnej, przeliczalnej bazie funkcji jednocząstkowych $\phi_{i\sigma}(x)$:

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(x) = \sum_i \phi_{i\sigma}(x) \hat{a}_{i\sigma}, \quad (2.4)$$

gdzie operator $\hat{a}_{i\sigma}$ anihiluje cząstkę typu σ ze stanu opisywanego orbitalem $\phi_{i\sigma}(x)$ oraz spełnia następujące związki: $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{i,j}$, $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$. Ostatecznie otrzymujemy hamiltonian (2.2) w użytecznej do analizy numerycznej formie:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_{i,j} E_{ij\sigma} \hat{a}_{j\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} + \sum_{ijkl} U_{ijkl} \hat{a}_{i\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}, \quad (2.5)$$

gdzie energie $E_{ij\sigma}$ oraz dwuciałowy człon oddziaływania U_{ijkl} mogą być wyznaczone bezpośrednio ze wzorów:

$$E_{ij\sigma} = \int dx \phi_{i\sigma}^*(x) H_{\sigma}(x) \phi_{j\sigma}(x),$$

$$U_{ijkl} = g_{1D} \int dx \phi_{i\uparrow}^*(x) \phi_{j\downarrow}^*(x) \phi_{k\downarrow}(x) \phi_{l\uparrow}(x). \quad (2.6)$$

Ponieważ funkcje falowe $\phi_{i\sigma}(x)$ tworzą zupełną bazę stanów jednocząstkowych, to hamiltonian (2.5) jest równoważny hamiltonianowi (2.1). Wybierając $\phi_{i\sigma}(x)$ jako funkcje własne operatora różniczkowego H_{σ} , można doprowadzić do tego, że jedynie wyrazy diagonalne $E_{ii\sigma}$ pozostają niezerowe. Wtedy wzór (2.5) upraszcza się do postaci:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \sum_i E_{ii\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \sum_{ijkl} U_{ijkl} \hat{a}_{i\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k\downarrow} \hat{a}_{l\uparrow}, \quad (2.7)$$

gdzie $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma}$.

2.1 Stany jednociłowe

W celu wyznaczenia bazy jednociłowej, w której hamiltonian ma postać (2.7) należy rozwiązać zagadnienie własne problemu jednej cząstki w zewnętrznym potencjale $V(x)$:

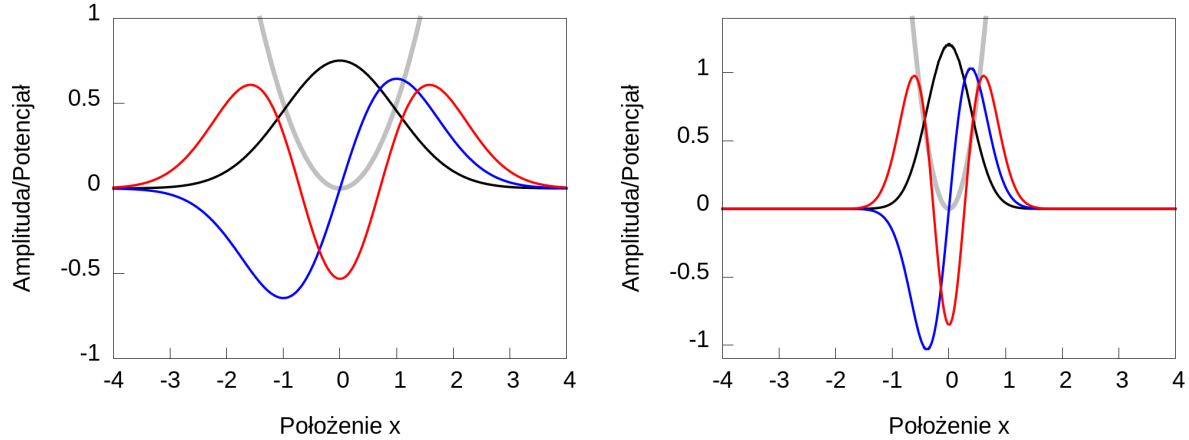
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \phi_i(x) = E_i \phi_i(x). \quad (2.8)$$

W zależności od konkretnej postaci potencjału $V(x)$ stany oraz energie własne układu można wyznaczyć analitycznie lub numerycznie. Na przykład jeżeli zewnętrzny potencjał, w którym jest uwięziona cząstka jest potencjałem harmonicznym o częstości ω , to rozwiązaniem zagadnienia własnego:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \phi_i(x) = E_i \phi_i(x)$$

jest rodzina funkcji falowych indeksowana liczbą kwantową n :

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right), \quad (2.9)$$



Rysunek 2.1: Na rysunkach przedstawiono schematycznie kształt potencjału (gruba szara linia) oraz kształty funkcji falowych pierwszych trzech stanów własnych (kolejno: czarna, niebieska oraz czerwona linia). Jeżeli po lewej stronie przedstawione by były funkcje falowe otrzymane dla atomu litu, to po prawej stronie są przedstawione odpowiadające jej funkcje falowe dla atomu potasu, który jest $40/6$ razy cięższy. Można zauważyć, że zgodnie ze wzorem (2.9), funkcja falowa jest $\sqrt{40/6}$ raza wyższa oraz $\sqrt{40/6}$ raza węższa niż funkcja falowa cząstki o masie jednostkowej.

gdzie H_n oznacza wielomian Hermite'a. Otrzymany zbiór funkcji falowych jest zupełny i funkcje spełniają warunek ortonormalności:

$$\int dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) = \delta_{mn}.$$

Energia n -tego stanu własnego nie zależy od masy cząstki i wynosi:

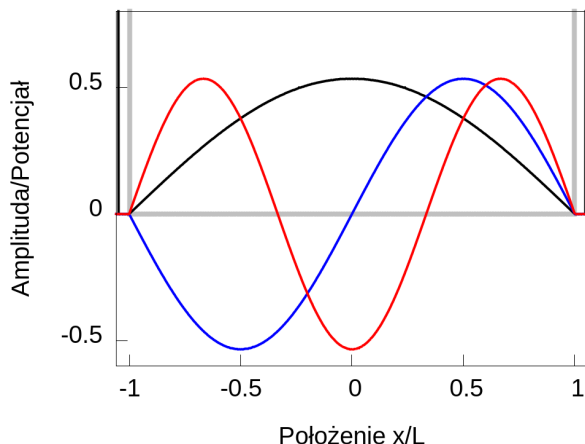
$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.10)$$

będąc liniową funkcją głównej liczby kwantowej n . Ze wzoru (2.9) wynika, że kształt funkcji falowej zależy bezpośrednio od masy cząstki. Jak przedstawiono na rysunku 2.1, im cięższa cząstka, tym węższe i bardziej zlokalizowane będą funkcje falowe.

Innym potencjałem, dla którego istnieją rozwiązania analityczne zagadnienia własnego (2.8) jest jednowymiarowa prostokątna studnia. Rozważmy zatem cząstkę o masie m poruszającą się w potencjale opisanym wzorem:

$$V_{\text{Box}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{jeżeli } |x| < L \\ \infty & \text{jeżeli } |x| > L. \end{cases} \quad (2.11)$$

W tak postawionym problemie mamy wyróżnioną naturalną skalę długości L . Rozwiązaniem



Rysunek 2.2: Na rysunku został przedstawiony schematycznie potencjał (2.11) (szara gruba linia). Funkcje falowe trzech pierwszych stanów własnych hamiltonianu (2.12) zostały narysowane kolejno: czarną, niebieską oraz czerwoną linią. Kształt funkcji falowej nie zależy od masy cząstki.

równania Schrödingera w tym potencjale:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{Box}}(x)\right) \phi_i(x) = E_i \phi_i(x) \quad (2.12)$$

są funkcje własne (przedstawione na rysunku 2.2):

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin\left(\frac{n\pi(x+L)}{2L}\right) \quad (2.13)$$

o następujących energiach własnych:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} n^2. \quad (2.14)$$

Energie własne (2.14) cząstki w studni prostokątnej, w przeciwieństwie do energii własnych (2.10) cząstki w potencjale harmonicznym, zależą od masy, a zależność od liczby kwantowej n nie jest liniowa, lecz kwadratowa. Ponadto funkcje falowe w studni prostokątnej (2.13) mają kształt bezpośrednio związany z rozmiarem studni $2L$ i nie zależą od masy cząstki, co także stanowi różnicę przy porównaniu ze stanami własnymi oscylatora harmonicznego (2.9).

Dla zupełnie dowolnej postaci potencjału $V(x)$, na ogół, nie można otrzymać rozwiązania analitycznego równania Schrödingera. Niemniej, z pomocą przychodzą nam narzędzia numeryczne, dzięki którym można wyznaczyć stany własne oraz energie własne w potencjale zewnętrznym o dowolnym kształcie. W tym celu należy wykonać diagonalizację hamiltonianu w reprezentacji położeniowej na gęstej siatce. Siatka przestrzenna jest utworzona przez podzie-

lenie przestrzeni na dyskretne kawałki z odstępem δx : $\{x_0, x_1, x_2, \dots\}$, gdzie $x_{i+1} = x_i + \delta x$. Następnie przyjmując za funkcje bazowe $f_i(x)$ funkcje stałe na odcinku δx postaci:

$$f_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\delta x}} & |x - x_i| \leq \delta x \\ 0 & |x - x_i| > \delta x, \end{cases} \quad (2.15)$$

możemy numerycznie rozwiązać zagadnienie własne. W tej reprezentacji jednocząstkowy hamiltonian (2.8) ma prostą, trójdiagonalną formę. Dzięki temu diagonalizacja może być wykonana za pomocą standardowych metod [70]. Jest dosyć oczywiste, że wraz ze zmniejszaniem wartości δx stany własne i ich energie własne będą zbiegać do dokładnych wartości. Do dalszej analizy numerycznej będzie potrzebne N_{MAX} najniższych stanów jednociąlowych (ta liczba będzie zależała od konkretnego problemu). W tej rozprawie będziemy zakładać, że zbieżność jest osiągnięta, jeżeli zmniejszanie δx nie powoduje zmian na trzeciej cyfrze znaczącej energii własnej stanu jednociąlowego o indeksie N_{MAX} .

2.2 Metody numeryczne

Wyniki mojej rozprawy opierają się na badaniu własności stanów własnych hamiltonianu (2.5). Dokładne rozwiązania analityczne mają bardzo dużą wartość, jednak w tak skomplikowanych układach jak kwantowe, oddziałujące mieszaniny wielu ciał, rozwiązania analityczne można spotkać tylko dla szczególnych przypadków (na przykład dla oddziaływania $g_{1D} = 0$ lub $g_{1D} = \infty$). Modele teoretyczne można próbować uprościć stosując różne przybliżenia, lecz wtedy zawsze istnieje zagrożenie, że zastosowane uproszczenie pozbawi modelu kluczowych cech. Z pomocą przychodzą metody numeryczne, które pozwalają na znalezienie stanów własnych nawet bardzo skomplikowanych modeli.

Aby znaleźć stany własne układu opisanego hamiltonianem (2.5) należały zdiagnozować macierz tego hamiltonianu w pewnej bazie wielociąlowej. Hamiltonian ten nie sprzęga podprzestrzeni Hilberta o różnej liczbie cząstek, dlatego może być zdiagnozowany oddzielnie w każdej z podprzestrzeni o ustalonej liczbie cząstek. W tej sekcji krótko przedstawię metody, z których skorzystano, aby znaleźć owe rozwiązania. Będziemy zainteresowani reżimem niskich temperatur, zatem skupimy się na analizie wielociąlowego stanu podstawowego oraz najniższych stanów wzbudzonych. To podejście pomoże nam rozwiązać pierwszy problem, na który się natykamy, mianowicie, nieskończone sumy w wyrażeniu (2.5). Rozwiązaniem jest wprowadzenie obciążenia na odpowiednio wysoko wzbudzonym stanie jednociąlowym $i = N_{\text{MAX}}$. Wtedy:

$$\hat{\Psi}_\sigma(x) \approx \sum_{i=0}^{N_{\text{MAX}}} \phi_{i\sigma}(x) \hat{a}_{i\sigma}, \quad (2.16)$$

dzięki czemu macierz reprezentująca hamiltonian (2.5) ma skończone wymiary i można ją numerycznie zdiagnozować.

Do opisu stanu podstawowego nieoddziałującego układu N cząstek w zewnętrznym potencjale $V(x)$ wystarczy N orbitali jednociąłowych będących rozwiązaniem jednocząstkowego problemu w tym potencjale. Jednak jeżeli rozważamy oddziałujący układ cząstek ($g_{1D} \neq 0$), do konstrukcji stanów własnych potrzebna będzie baza wielociąłowa rozpięta na większej liczbie stanów jednocząstkowych. Obcięcie N_{MAX} będziemy uważać za wystarczające, jeżeli zwiększanie liczby orbitali jednociąłowych nie powoduje istotnych zmian w wynikach dla danego problemu wielociąłowego.

Jednym z elementów niezbędnych do sprawnego poruszania się w obciętej do N_{MAX} stanów jednociąłowych przestrzeni Focka są dobrze zdefiniowane i uporządkowane wektory tejże bazy. W przypadku fermionów orbital może być zajęty maksymalnie przez jedną cząstkę danego typu ($n_{i\sigma} = \{0, 1\}$). Zatem w reprezentacji obsadzeniowej wektory bazy Focka przyjmują postać:

$$|\iota\rangle = |n_{1\downarrow}, n_{2\downarrow}, \dots, n_{N_{\text{MAX}}\downarrow}\rangle \otimes |n_{1\uparrow}, n_{2\uparrow}, \dots, n_{N_{\text{MAX}}\uparrow}\rangle, \quad (2.17)$$

gdzie liczba fermionów danego typu na wszystkich orbitalach musi się sumować do całkowitej liczby fermionów N_σ :

$$\sum_i n_{i\sigma} = N_\sigma.$$

Dowolny wielociąłowy stan układu będzie superpozycją stanów bazowych postaci (2.17):

$$|\eta\rangle = \sum_\iota \alpha_{i\eta} |\iota\rangle, \quad (2.18)$$

gdzie $\alpha_{i\eta} = \langle \iota | \eta \rangle$. Stany $|\iota\rangle$ są stanami własnymi układu nieoddziałującego $g_{1D} = 0$, a w obecności oddziaływania, nowe stany własne układu oddziałującego można utworzyć poprzez superpozycję stanów bazowych $|\iota\rangle$. Można je wyznaczyć na przykład korzystając z hamiltonianu (2.7) wyrażonego w bazie (2.17). Otrzymaną w ten sposób macierz:

$$H_{\iota'\iota} = \langle \iota' | \hat{H} | \iota \rangle$$

należy zdiagnozować, aby znaleźć energie \mathcal{E}_i oraz wielociąłowe stany własne $|\psi_i\rangle$ układu opisanego przez ten hamiltonian.

Wymiar przestrzeni Focka dla mieszaniny dwóch rodzajów cząstek o liczbie N_\downarrow, N_\uparrow , których stany jednociąłowe są obcięte do N_{MAX} wynosi:

$$\dim(\mathcal{F}) = \left(\frac{N_{\text{MAX}}!}{(N_{\text{MAX}} - N_\downarrow)! N_\downarrow!} \right) \left(\frac{N_{\text{MAX}}!}{(N_{\text{MAX}} - N_\uparrow)! N_\uparrow!} \right). \quad (2.19)$$

Liczba $\dim(\mathcal{F})$ jest jednocześnie wymiarem macierzy hamiltonianu (2.5). Wymiar ten bardzo szybko rośnie wraz ze zwiększaniem zarówno liczby cząstek N_σ jak i rozmiarem bazy jednociąłowej N_{MAX} ¹. Z własności silni oraz ze wzoru (2.19) wynika, że dla ustalonej całkowitej liczby cząstek $N = N_\downarrow + N_\uparrow$ wymiar bazy jest największy dla możliwie najbardziej symetrycznej sytuacji. Na przykład dla $N = 10$ cząstek i $N_{\text{MAX}} = 14$ orbitali jednociąstkowych konfiguracji $N_\downarrow = 1, N_\uparrow = 9$ odpowiada znacznie mniejsza macierz $H_{ii'}$ niż konfiguracji $N_\downarrow = 5, N_\uparrow = 5$. W pierwszym wypadku rozmiar macierzy wynosi $\dim(\mathcal{F}) = 28\,028$, a w drugim aż $\dim(\mathcal{F}) = 4\,372\,368$.

Program komputerowy służący do analizy mieszaniny fermionów, ze względu na potrzebę szybkiego wykonywania operacji na macierzach o wymiarach $\dim(\mathcal{F})$, został napisany w języku **FORTRAN**. Małe macierze są diagonalizowane przy użyciu standardowych bibliotek do algebry liniowej, np. *LAPACK* [71]. Po wnikliwej analizie zagadnienia można zauważyć, że im większy jest rozważany układ, tym mniejszy jest odsetek niezerowych elementów macierzowych hamiltonianu (2.5). To oznacza, że macierz hamiltonianu jest tzw. *macierzą rzadką*. W takim wypadku standardowy sposób zapisu macierzy jest mało efektywny, ponieważ większość zapisanych elementów ma wartość zero. Ponadto wszelkie działania na elementach zerowych bez potrzeby wydłużają czas obliczeń (na przykład przy mnożeniu macierzy przez wektor lub przez inną macierz).

Rozwiązaniem tego problemu jest zaimplementowanie metody diagonalizacji dla macierzy rzadkich, w której nie ma potrzeby zapisywania zer w pamięci komputera oraz wykonywania niepotrzebnych działań na elementach zerowych. Do uzyskania wyników prezentowanych w tej rozprawie ścisła diagonalizacja została wykonywana za pomocą metody Arnoldiego [72], która z wielkim powodzeniem była wykorzystywana w podobnych modelach [62, 73, 74]. Istota metody polega na wielokrotnym mnożeniu losowego wektora b o jednostkowej normie przez macierz A , której wektory i wartości własne należy wyznaczyć. Z uzyskanego w ten sposób zbioru nieortogonalnych wektorów $\{b, Ab, A^2b, A^3b, \dots, A^n b\}$ można otrzymać ortonormalny zestaw wektorów stosując metodę Grama-Schmidta. Otrzymane po wielokrotnych iteracjach wektory są dobrym przybliżeniem wektorów własnych odpowiadających największym wartościom własnym macierzy A . Stosując drobne modyfikacje, można alternatywnie odszukać najmniejsze wartości własne macierzy A , co jest bezpośrednio stosowane w zagadnieniu znajdowania stanu podstawowego hamiltonianu \hat{H} . Metoda Arnoldiego jest wydajna ze względu na dużą szybkość mnożenia wektora przez macierz rzadką. Istnieją również pochodne metody ścisłej diagonalizacji wykorzystujące na przykład użycie efektywnego oddziaływania i dają bardzo dobre wyniki w szerokim zakresie oddziaływań [69, 75]. Niestety, nie są znane rozszerzenia tych metod na mieszaniny cząstek o różnych masach.

Wynikiem procedury diagonalizacji hamiltonianu \hat{H} są wielociąłowe stany własne $|\psi_i\rangle$ oraz

¹Silnie we wzorze (2.19) dla odpowiednio dużych liczb N_σ, N_{MAX} można przybliżyć za pomocą wzoru Stirlinga zależnością wykładniczą. To oznacza, że wymiar bazy $\dim(\mathcal{F})$ rośnie wykładniczo wraz ze wzrostem liczby cząstek oraz stanów jednociąłowych.

ich energie \mathcal{E}_i , spełniające z definicji równanie własne:

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = \mathcal{E}_i|\psi_i\rangle. \quad (2.20)$$

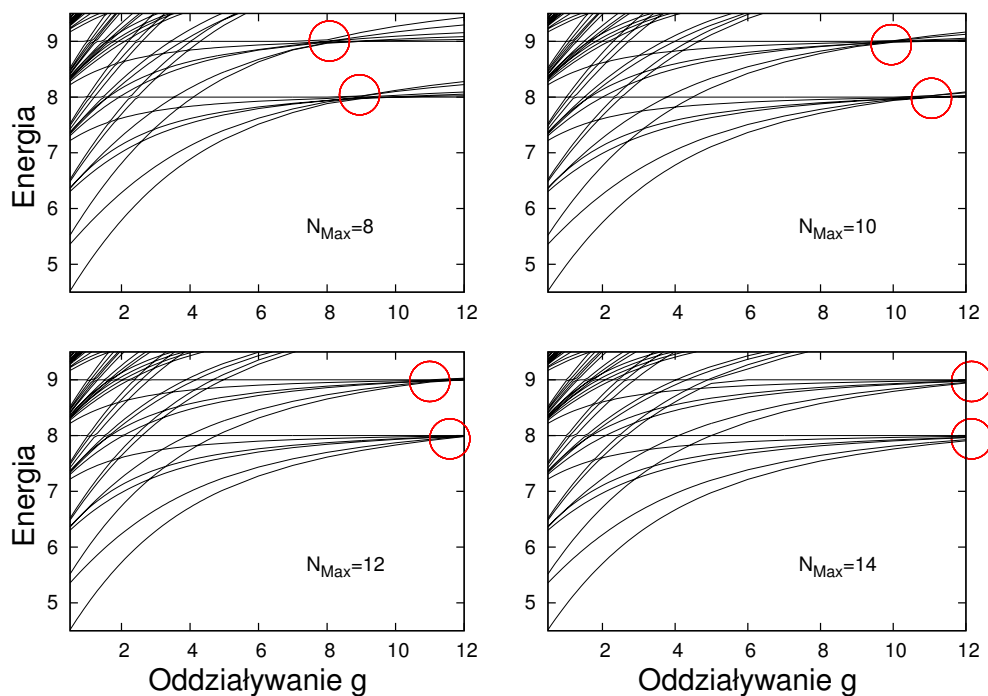
Ceną za szybkość metody Arnoldiego jest otrzymanie niepełnego widma, lecz podzbioru wektorów własnych o najniższych wartościach własnych (zwykle w moich obliczeniach jest to nie więcej niż kilka procent wszystkich wartości własnych). Nie jest to jednak duża niedogodność, ponieważ zazwyczaj analizowany będzie jedynie stan podstawowy lub kilkanaście pierwszych stanów wzbudzonych. Metoda ścisłej diagonalizacji nie charakteryzuje się szczególnie szybką zbieżnością wartości energii własnych wraz ze zwiększaniem obciążenia bazy jednociąłowej N_{Max} . Energia stanu podstawowego może zostać wyznaczona dużo dokładniej za pomocą technik opartych na metodzie wariacyjnej. Na rysunku 2.3 przedstawiono widma energetyczne dla różnej liczby stanów jednociąłowych. Można zaobserwować, że dla skończonej wartości parametru N_{Max} zawsze istnieje pewna wartość oddziaływania g , dla której energie stanów quasi-zdegenerowanych się przecinają. Nie jest to własność układu, a jedynie artefakt numeryczny związany ze skończoną liczbą stanów jednociąłowych. To oznacza, że przeprowadzając diagonalizację oraz prowadząc jakiegokolwiek dalsze obliczenia należy upewnić się, że zostało użytych wystarczająco dużo stanów jednociąłowych. Ogromną zaletą ścisłej diagonalizacji jest wyznaczenie nie tylko energii własnych hamiltonianu, ale przede wszystkim stanów własnych: oprócz wielociąłowego stanu podstawowego także stanów wzbudzonych. Dostęp do stanów wzbudzonych jest potrzebny na przykład w sytuacji, gdy chcemy poznać własności układu w skończonej temperaturze lub własności dynamiczne.

Wielociąłowe funkcje falowe są skomplikowanymi wielowymiarowymi obiektami, trudnymi w bezpośredniej analizie, więc w tej rozprawie główny nacisk będzie położony na badanie prostszych obiektów, które mogą być wyznaczone z funkcji falowych. Tymi obiektami są różnego rodzaju funkcje korelacji. Posiadając informację o korelacjach do N -tego rzędu włącznie w badanym układzie można odtworzyć pełną funkcję falową N ciał. Im wyższa funkcja korelacji, tym bardziej jest skomplikowanym obiektem matematycznym oraz tym trudniej ją wyznaczyć zarówno teoretycznie jak i doświadczalnie.

Jedną z najważniejszych obserwacji, która jest mierzona z powodzeniem w doświadczeniach jest profil gęstości jednociąłowej $\rho_\sigma(x)$, który dla dowolnego stanu wielociąłowego $|\psi\rangle$ oraz dla składnika σ jest zdefiniowany jako:

$$\rho_\sigma(x) = \langle \psi | \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) \hat{\Psi}_\sigma(x) | \psi \rangle. \quad (2.21)$$

Profil gęstości ma bezpośredni związek z gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki



Rysunek 2.3: Wykres przedstawia widmo energetyczne układu $N_1 = N_2 = 2$ cząstek o tej samej masie w funkcji oddziaływania g . Kolejne panele różnią się liczbą stanów jednociałowych N_{MAX} , które zostały użyte do obliczeń. Energie stanów wielociałowych przecinają się w pewnym punkcie (miejsca zaznaczone czerwonymi okręgami), jednak jest to artefakt numeryczny, który można zniwelować używając wyższej liczby stanów wielociałowych. Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_1}$.

typu σ w punkcie x i jest znormalizowany do liczby cząstek:

$$N_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_\sigma(x).$$

Ostatnie eksperymenty pokazały, że możliwe jest jednoczesne zarejestrowanie położenia wielu ultrazimnych atomów [19–27]. To oznacza, że korelacje wielociałowe wyznaczone teoretycznie [76] mogą być mierzone eksperymentalnie. Dzięki nowemu narzędziu fizyka teoretyczna zyskuje możliwość weryfikacji przewidywań dotyczących korelacji w układach kwantowych. Najprostszą wielkością, która zawiera informacje o obu składnikach jest korelacja par, zdefiniowana na stanie $|\psi\rangle$ za pomocą wzoru:

$$C(x, y) = \langle \psi | \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(x) \hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(y) \hat{\Psi}_\uparrow(y) \hat{\Psi}_\downarrow(x) | \psi \rangle. \quad (2.22)$$

Korelacja par zawiera więcej informacji niż gęstość jednocząstkowa. Co więcej w korelacji tej zawarta jest informacja o gęstości jednocząstkowej:

$$\rho_\downarrow(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x, y) dy,$$

$$\rho_\uparrow(y) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x, y) dx.$$

W następnym rozdziale zostanie podjęta próba odpowiedzi na pytanie czy w korelacji par mogą być zawarte inne przydatne informacje o układzie.

Dalsza część rozprawy jest poświęcona dokładnej analizie numerycznej układu o różnych masach opisanego za pomocą hamiltonianu (2.5) ze szczególnym naciskiem na analizę widm, profilów gęstości jednociałowej oraz korelacji par, czyli wielkości, które mogą zostać zmierzone w eksperymentach.

Rozdział 3

Separacja środka masy

Układy kilku ciał, ze względu na liczbę stopni swobody, są bardzo skomplikowane i przez to trudne do analizy za pomocą metod analitycznych oraz numerycznych. Z kolei metody dedykowane dla problemów wielu ciał (np. pola średniego) nie działają dobrze dla małej liczby cząstek. Stąd, w ogólności, układy z mezoskopową liczbą cząstek są bardzo trudne do badania teoretycznego. Jednym ze sposobów, aby pokonać powyższe problemy może być opis badanego układu we współrzędnych, które są związane z naturalnymi stopniami swobody układu. Wiadomo, że istnieją takie zmienne uogólnione, w których opis układu jest bardzo prosty. Niemniej, nawet dla niewielkiej liczby cząstek należałoby wykonać nietrywialne transformacje, aby wprowadzić takie naturalne zmienne [28–38]. Przykładowo dla czterech cząstek wygodnie jest wprowadzić zmienne Jacobiego [67, 77]. Sytuacja komplikuje się dla większej liczby cząstek i w praktyce takie podejście jest nie do zaimplementowania. Oprócz problemów z implementacją, w przypadku opisu kwantowego, pojawiają się dodatkowe trudności związane z nierozróżnialnością cząstek. Antysymetryzacja funkcji falowej w języku zmiennych uogólnionych prowadzi do nietrywialnych więzów w obrazie wielociałowym.

Dodatkowo, zmienne uogólnione mogą nie być najlepsze do analizy danych eksperymentalnych, ponieważ detektory, w tym mikroskopy atomowe, mierzą bezpośrednio położenia cząstek. Wygodniejszym rozwiązaniem byłby opis teoretyczny układu wykonany w najbardziej naturalnych zmiennych, tzn. położeniach cząstek zmierzonych w doświadczeniu. Niestety, w tym przypadku zachowuje się wiele nadmiarowej informacji pochodzącej z trywialnej dynamiki środka masy układu, który zupełnie nie zależy od oddziaływań między cząstkami. W przypadku układów ciał umieszczonych w zewnętrznym potencjale harmonicznym, można odseparować ruch środka masy [28–32, 77–84]. W rozdziale tym, opartym na pracy [1], będzie poruszone zagadnienie środka masy w układzie kilku ciał.

Założmy, że w hamiltonianie (2.1) oba składniki są umieszczone w zewnętrznym potencjale harmonicznym, tzn. $V_\sigma(x) = m_\sigma \omega^2 x^2 / 2$. Dla obu rodzajów atomów zakładamy tę samą częstość pułapkowania ω , a to oznacza tę samą skalę energii $\hbar\omega$, niezależnie od mas. W przypadku mie-

szanin różnych pierwiastków, z technicznych powodów, częstości pułapek dla obu z nich są różne. W doświadczeniu za pomocą regulacji parametrów wiązki laserowej można nieznacznie zmieniać częstość pułapki, w której poruszają się atomy. Przykładowo dla mieszaniny litu i potasu w doświadczeniu [85] stosunek częstości wyniósł $\omega_{\text{Li}}/\omega_{\text{K}} \approx 1.7$, co oznacza, że częstości są tego samego rzędu. Założenie równych częstości znacznie upraszcza analizę i chociaż jest słuszne w zasadzie tylko dla układów o równych masach, nie wpływa znacząco na wyniki w układach o różnych masach. Problem ten zostanie omówiony szerzej w Rozdziale 5.

Niestety nie możemy jednoznacznie, tak jak w przypadku jednostki energii, wybrać jednostki długości. Z analizy wymiarowej wynika bowiem, że jednostka ta będzie zależna od jednostki masy. Niech wszystkie masy będą zatem mierzone jako wielokrotności masy m_{\downarrow} i będziemy przyjmować, że $m_{\downarrow} \leq m_{\uparrow}$. Konsekwencją tego wyboru jednostki masy jest ustalenie jednostki długości: $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$. Hamiltonian (2.1) w bezwymiarowej formie przyjmuje postać:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} x_i^2 \right] + \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} \left[-\frac{1}{\mu} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + \mu \frac{1}{2} y_j^2 \right] + g \sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} \delta(x_i - y_j), \quad (3.1)$$

gdzie $\mu = m_{\uparrow}/m_{\downarrow}$ jest stosunkiem mas cząstek, a bezwymiarowa stała sprzężenia oddziaływania wynosi, $g = g_{1D} \sqrt{m_{\downarrow}/(\hbar^3 \omega)}$.

3.1 Dwa rozróżnialne atomy

Można się spodziewać, że w modelu opisywanym za pomocą hamiltonianu (2.1) statystyka kwantowa gra ważną rolę. Zanim zostanie omówiony ogólny przypadek mieszaniny wielu ciał, rozważmy najprostszy możliwy model, próbując w ten sposób zbudować intuicję do rozumienia układów wielu ciał. Taki minimalny model ($N_{\downarrow} = N_{\uparrow} = 1$) będzie się składał z dwóch rozróżnialnych cząstek umieszczonych w potencjale harmonicznym o częstości ω , oddziałujących kontaktowo potencjałem typu δ . Cząstki są rozróżnialne, więc ich opis kwantowomechaniczny jest stosunkowo prosty. Nie trzeba bowiem nakładać dodatkowych warunków na funkcję falową, tzn. funkcja falowa nie musi być ani symetryczna, ani antysymetryczna. Z tego powodu, wyjątkowo w tej pracy, nie będę korzystał z reprezentacji obsadzeń, lecz z reprezentacji położeniowej. Wyniki uzyskane poniżej dla dwóch ultrazimnych atomów będą rozszerzeniem układu badanego w pracy [28] na sytuację, gdy atomy mają różne masy.

Hamiltonian (3.1) dla układu dwóch rozróżnialnych cząstek redukuje się do:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2} x_1^2 - \frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\mu}{2} y_1^2 + g \delta(x_1 - y_1). \quad (3.2)$$

Zagadnienie własne hamiltonianu (3.2) można stosunkowo łatwo rozwiązać wprowadzając po-

łożenie środka masy oraz położenie względne:

$$\begin{aligned} R_{\text{CM}} &= \frac{x_1 m_{\downarrow} + y_1 m_{\uparrow}}{m_{\downarrow} + m_{\uparrow}} = \frac{x_1 + \mu y_1}{1 + \mu}, \\ r &= x_1 - y_1. \end{aligned}$$

W nowych zmiennych hamiltonian separuje się na część związaną z ruchem środka masy \hat{H}_{CM} oraz na część związaną z położeniem względnym cząstek \hat{H}_{REL} :

$$\hat{H}(R_{\text{CM}}, r) = \underbrace{-\frac{1}{2} \frac{1}{1 + \mu} \frac{\partial^2}{\partial R_{\text{CM}}^2} + \frac{1}{2} (1 + \mu) R_{\text{CM}}^2}_{\hat{H}_{\text{CM}}(R_{\text{CM}})} \underbrace{-\frac{1}{2} \frac{1 + \mu}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \frac{\mu}{1 + \mu} r^2 + g\delta(r)}_{\hat{H}_{\text{REL}}(r)}. \quad (3.3)$$

Hamiltonian \hat{H}_{CM} opisuje ruch ciała o masie równej sumie mas wszystkich cząstek $1 + \mu$ w potencjale harmonicznym o częstości ω . Natomiast hamiltonian \hat{H}_{REL} opisuje ruch ciała o masie równej zredukowanej masie układu $\mu/(1 + \mu)$ w identycznym potencjale. Warto zwrócić uwagę, że wkład od oddziaływania występuje tylko w hamiltonianie zmiennych względnych \hat{H}_{REL} . To oznacza, że część opisująca ruch środka masy jest trywialna (nie zależy od oddziaływania), natomiast cała zależność od oddziaływania występuje w zmiennych związanych z ruchem względnym. Skalując odpowiednio zmienne:

$$\begin{aligned} R_{\text{CM}} &\rightarrow R_{\text{CM}} \frac{1}{\sqrt{1 + \mu}}, \\ r &\rightarrow r \sqrt{\frac{\mu}{1 + \mu}}, \end{aligned}$$

możemy sprowadzić problem układu dwóch cząstek o różnej masie do problemu układu cząstek o równych masach, które oddziałują silniej o czynnik $\sqrt{\mu/(1 + \mu)}$:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{2} R^2 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} r^2 + \sqrt{\frac{\mu}{1 + \mu}} g\delta(r).$$

Energie własne hamiltonianu \hat{H}_{REL} można znaleźć rozwiązując odpowiednie równanie przebiegające [28].

3.2 Hamiltonian środka masy

Użycie zmiennych, w których możliwa jest separacja hamiltonianu (3.3) na część związaną z ruchem środka masy oraz część związaną z ruchem względnym nie jest przypadkowa. Zarówno w mechanice klasycznej jak i w mechanice kwantowej [86–88] istnieje szczególna klasa proble-

mów, które są opisane za pomocą hamiltonianów będących formą kwadratową położeń i pędów. W takim wypadku, jeżeli oddziaływanie między cząstkami zależy tylko od ich względnych położeń, można tak kanonicznie przekształcić zmienne dynamiczne, aby ruch środka masy separował się od ruchu względnego układu. Oddziaływania nie wpływają na ruch środka masy, lecz tylko na ruch pozostałych stopni swobody. Procedurę separacji można wykonać dla dwóch ciał (jak pokazaliśmy w poprzedniej sekcji), a także dla większej liczby cząstek [29–31, 79, 80]. Czasami niezbędne jest wykorzystanie wyrafinowanych metod opisujących ruch względny [32, 67].

Położenie środka masy klasycznego układu $N_{\downarrow} + N_{\uparrow}$ cząstek jest dobrze zdefiniowaną wielkością wyrażoną wzorem:

$$R_{\text{CM}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} x_i \cdot m_{\downarrow} + \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} y_j \cdot m_{\uparrow}}{N_{\downarrow} \cdot m_{\downarrow} + N_{\uparrow} m_{\uparrow}} = (N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})^{-1} \left(\sum_{i=1}^{N_{\downarrow}} x_i + \sum_{j=1}^{N_{\uparrow}} \mu \cdot y_j \right). \quad (3.4)$$

Wielkość (3.4) jest liniową funkcją położeń poszczególnych cząstek, więc odpowiadający jej kwantowomechaniczny operator (zapisany w formalizmie drugiej kwantyzacji) jest zdefiniowany następująco:

$$\hat{R}_{\text{CM}} = (N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})^{-1} \int dx \left(\hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x) x \hat{\Psi}_{\downarrow}(x) + \mu \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x) x \hat{\Psi}_{\uparrow}(x) \right). \quad (3.5)$$

Rozkładając operatory pola zgodnie z definicją (2.4) w bazie funkcji własnych odpowiedniego oscylatora harmonicznego $\phi_{i\sigma}(x)$ operator środka masy przyjmuje postać:

$$\hat{R}_{\text{CM}} = (N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})^{-1} \sum_{ij} \sum_{\sigma} X_{ij,\sigma} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j\sigma}. \quad (3.6)$$

Dla wygody zostały wprowadzone współczynniki:

$$X_{ij,\sigma} = \mu_{\sigma} \int dx \phi_{i\sigma}^*(x) x \phi_{j\sigma}(x), \quad (3.7)$$

gdzie $\mu_{\downarrow} = 1$ oraz $\mu_{\uparrow} = \mu$. Analogicznie, można wprowadzić operator całkowitego pędu (pędu środka masy):

$$\hat{P}_{\text{CM}} = -i \int dx \left(\hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_{\downarrow}(x) + \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{\Psi}_{\uparrow}(x) \right), \quad (3.8)$$

który może być zapisany do postaci:

$$\hat{P}_{\text{CM}} = \sum_{ij} \sum_{\sigma} P_{ij,\sigma} \hat{a}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{j\sigma}, \quad (3.9)$$

gdzie odpowiednie współczynniki $P_{lm,\sigma}$ są zdefiniowane jako:

$$P_{lm,\sigma} = -i \int dx \phi_{l\sigma}^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi_{m\sigma}(x). \quad (3.10)$$

Operator całkowitego pędu \hat{P}_{CM} oraz operator położenia środka masy \hat{R}_{CM} są kanonicznie sprzężonymi zmiennymi i zachodzą między nimi standardowe relacje przemienności: $[\hat{R}_{\text{CM}}, \hat{P}_{\text{CM}}] = i$ oraz $[\hat{R}_{\text{CM}}, \hat{R}_{\text{CM}}] = [\hat{P}_{\text{CM}}, \hat{P}_{\text{CM}}] = 0$. Hamiltonian środka masy zapisany w jednostkach bezwymiarowych ma postać:

$$\hat{H}_{\text{CM}} = \frac{\hat{P}_{\text{CM}}^2}{2(N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})} + \frac{(N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})}{2} \hat{R}_{\text{CM}}^2. \quad (3.11)$$

Podobnie jak dla dwóch atomów, uogólniony na wiele cząstek hamiltonian środka masy (3.11) opisuje ruch cząstki o masie równej całkowitej masie układu $(N_{\downarrow} + \mu N_{\uparrow})$ w potencjale harmonicznym o częstości ω . Całkowity hamiltonian może być rozłożony w sposób następujący: $\hat{H} = \hat{H}_{\text{CM}} + \hat{H}_{\text{REL}}$. \hat{H}_{REL} jest hamiltonianem ruchu względego i tylko ta część zawiera całą informację o oddziaływaniach między ultrazimnymi fermionami. Można łatwo sprawdzić, że całkowity hamiltonian układu \hat{H} jest przemienny z hamiltonianem środka masy \hat{H}_{CM} oraz z hamiltonianem względnym \hat{H}_{REL} , tzn. zachodzi $[\hat{H}, \hat{H}_{\text{CM}}] = [\hat{H}, \hat{H}_{\text{REL}}] = 0$. To oznacza, że istnieje baza w wielociałowej przestrzeni Hilberta, w której wszystkie trzy hamiltoniany przyjmują jednocześnie postać diagonalną.

Każdy stan własny hamiltonianu (2.2) może być opisany zestawem $N = N_{\downarrow} + N_{\uparrow}$ liczb kwantowych. Ponieważ środek masy się odseparowuje, pozostałe $N - 1$ liczb kwantowych opisuje oddziałującą część układu. Stąd, całkowita energia \mathcal{E} dowolnego stanu własnego hamiltonianu (2.2) może być zapisana w postaci:

$$\mathcal{E}(v_1, v_2, \dots, v_N) = \underbrace{\mathcal{E}(v_1)}_{(v_1 + \frac{1}{2})} + \mathcal{E}(v_2, v_3, \dots, v_N), \quad (3.12)$$

gdzie $\mathbf{v} = (v_1; v_2, \dots, v_N)$ jest zbiorem liczb kwantowych opisujących dany stan kwantowy hamiltonianu \hat{H} oraz $\mathcal{E}(v_1)$ odpowiada energii środka masy w tym stanie. Naturalnie, dla danego zestawu liczb kwantowych (v_2, v_3, \dots, v_N) opisujących wzbudzenia ruchu względnego, istnieje nieskończenie wiele stanów o różnej wartości v_1 z energiami oddzielnymi o pojedyncze wzbudzenie środka masy $\hbar\omega$.

3.3 Widmo hamiltonianu

W celu analizy widma pod kątem jego nietrywialnej części $\mathcal{E}(v_2, v_3, \dots, v_N)$ zaprezentowana zostanie metoda filtrowania widma [1]. Metoda odfiltrowania z widma energetycznego hamiltonianu (2.5) wzbudzeń środka masy bierze się z trywialnej obserwacji, że stany własne hamil-

tonianu \hat{H} są iloczynami stanów własnych hamiltonianów \hat{H}_{CM} oraz \hat{H}_{REL} . Ten fakt oraz to, że hamiltoniany \hat{H} oraz \hat{H}_{CM} są przemienne, powoduje, że można użyć wielociałowego stanu własnego hamiltonianu \hat{H} do wyznaczenia energii własnej $\mathcal{E}(v_1)$ ruchu środka \hat{H}_{CM} .

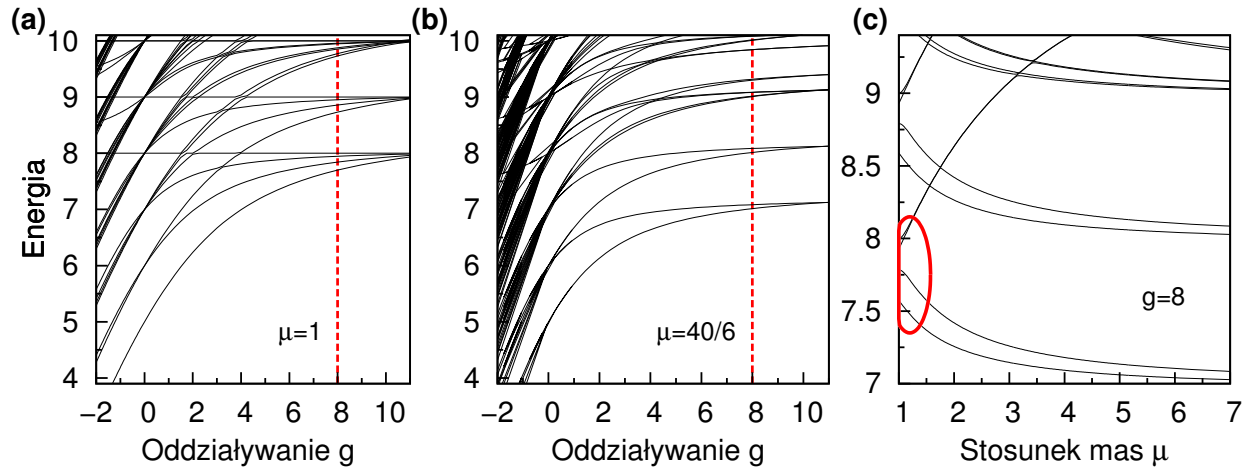
Następnie, przez zebranie wszystkich stanów własnych całkowitego hamiltonianu \hat{H} z tą samą wartością energii własnej $\mathcal{E}(v_1)$, otrzymujemy zbiór stanów, w którym każdy stan ma tę samą liczbę wzbudzeń środka masy. Energie $\mathcal{E}(v_2, v_3, \dots, v_N)$ związane z tym zbiorem stanów tworzą widmo odfiltrowane. Wybór liczby kwantowej v_1 jest dowolny, ale z powodów technicznych (metoda ściślejszej diagonalizacji jest najbardziej dokładna dla stanów o niskiej energii), najlepszym wyborem jest wybranie wszystkich stanów o wartości liczby kwantowej $v_1 = 0$, odpowiadającej stanowi podstawowemu wzbudzenia środka masy o energii własnej $\hbar\omega/2$.

Sytuacja jest odrobinę bardziej skomplikowana, jeżeli wielociałowe stany własne hamiltonianu \hat{H} są j -krotnie zdegenerowane. To oznacza, że cały zbiór stanów własnych $\{|\psi_{m_1}\rangle, \dots, |\psi_{m_j}\rangle\}$ pełnego hamiltonianu \hat{H} ma tę samą wartość energii własnej $\mathcal{E}_{m_1} = \mathcal{E}_{m_2} = \dots = \mathcal{E}_{m_j}$. Zauważmy, że dowolna superpozycja tych zdegenerowanych stanów własnych jest także stanem własnym hamiltonianu \hat{H} o tej samej energii \mathcal{E}_{m_j} . Istnieje jednak pewna specyficzna superpozycja stanów zdegenerowanych hamiltonianu \hat{H} , która daje w efekcie stany własne hamiltonianu \hat{H}_{CM} . Aby ją znaleźć, wyznaczamy elementy macierzowe hamiltonianu środka masy \hat{H}_{CM} w bazie zdegenerowanych stanów własnych $\langle\psi_i|\hat{H}_{\text{CM}}|\psi_{i'}\rangle$, gdzie $|\psi_i\rangle, |\psi_{i'}\rangle \in \{|\psi_{m_1}\rangle, \dots, |\psi_{m_j}\rangle\}$, a następnie diagonalizując taki blok znajdujemy stany własne hamiltonianu środka masy. Wybierając stan o odpowiedniej liczbie kwantowej v_1 wiemy, że ów stan jest stanem własnym hamiltonianów \hat{H}_{CM} oraz \hat{H} . Zatem znaleziona superpozycja jest szukanym stanem, który można dołączyć do zbioru odfiltrowanych stanów własnych.

Zauważmy, że w procedurze opisanej powyżej nie zakładaliśmy nic o oddziaływaniach, stosunku mas składników czy innych dodatkowych symetriach. To oznacza, że technika jest bardzo ogólna i może mieć szerokie zastosowanie.

Pierwszą wielkością fizyczną jaka nasuwa się na myśl przy analizowaniu własności dowolnego hamiltonianu jest jego widmo energetyczne. Typowe widmo hamiltonianu dla układów kilku oddziałujących kontaktowo fermionów zostało przedstawione na rysunku 3.1a. Energie nieoddziałujących fermionów (dla $g = 0$) mogą być wielokrotnie zdegenerowane. Oddziaływanie znosi tę degenerację i dopiero w granicy nieskończonego odpychania (dla $g \rightarrow \infty$) część stanów własnych ponownie jest zdegenerowana.

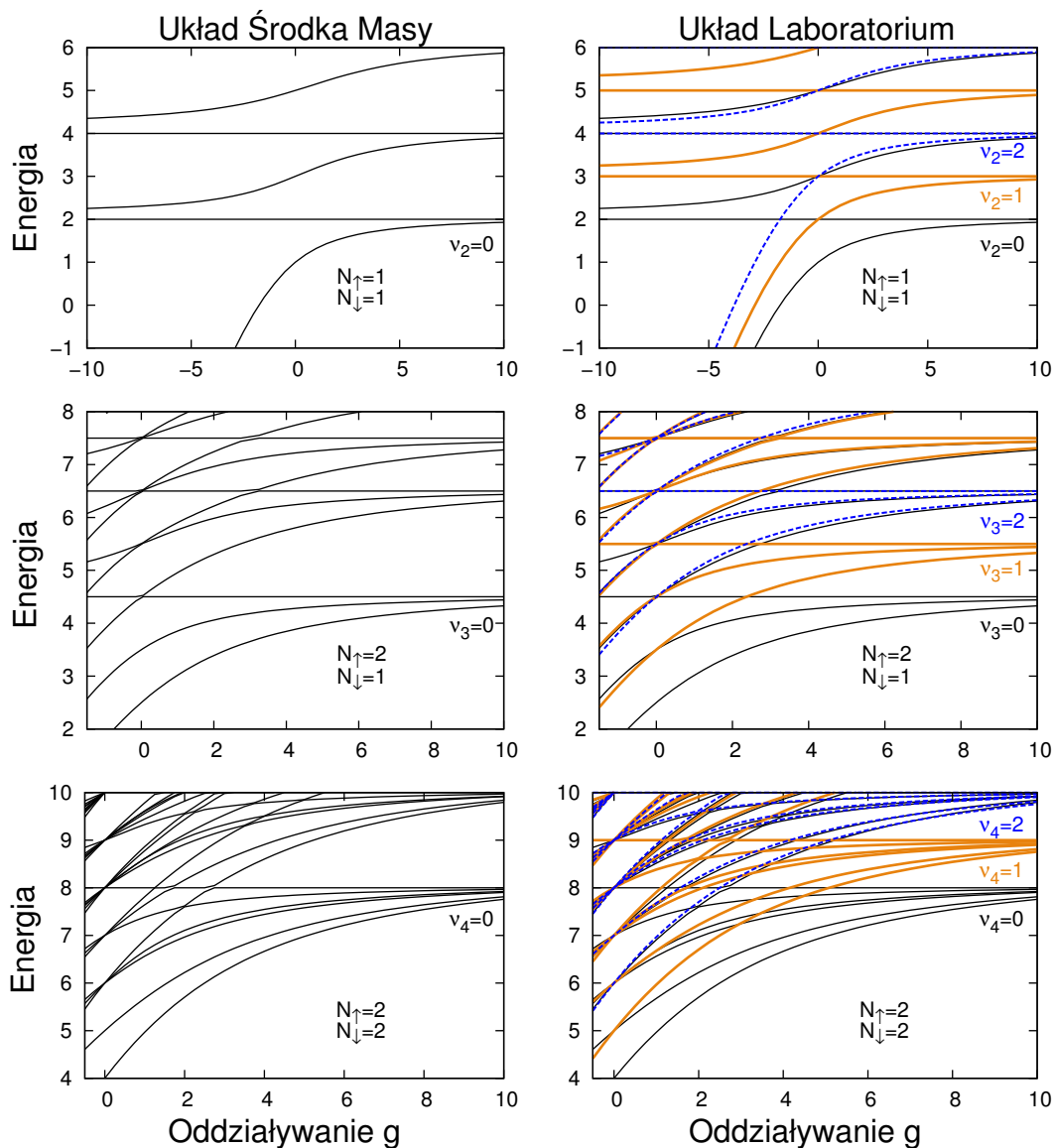
W przypadku mieszaniny fermionów o tych samych masach $\mu = 1$, hamiltonian układu jest symetryczny ze względu na zamianę jednego typu cząstek na drugi. To oznacza, że widmo układu $N_{\downarrow} = 3, N_{\uparrow} = 1$ atomów jest tożsame z widmem układu $N_{\downarrow} = 1, N_{\uparrow} = 3$ cząstek. Ta symetria wraz z zakazem Pauliego prowadzi do degeneracji energii wielociałowych w nieskończonym odpychaniu [45, 62]. Dzieje się tak dlatego, że zakaz Pauliego jest w pewnym sensie podobny do bardzo silnego odpychania — zarówno w jednym jak i w drugim przypadku fermiony będą siebie



Rysunek 3.1: (a) Widmo hamiltonianu (2.2) dla $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 1$ fermionów o równych masach w funkcji oddziaływania g . (b) Analogiczne widmo wyznaczone dla stosunku mas $\mu = 40/6$. W zależności od stosunku mas atomowych μ widma energetyczne różnią się jakościowo w granicy silnych oddziaływań. W szczególności podprzestrzenie zdegenerowane w $g \rightarrow \infty$ mają inne wymiary. (c) Widmo hamiltonianu (2.2) dla $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 1$ fermionów w silnym oddziaływaniu $g = 8$ w funkcji stosunku mas μ . Można zaobserwować, że zwiększenie stosunku mas prowadzi do rozdzielenia się czterokrotnie zdegenerowanej podprzestrzeni (zaznaczonej czerwoną elipsą), tak że stan podstawowy jest tylko dwukrotnie zdegenerowany. Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_{\downarrow}}$.

unikać. Pewną różnicą stanowi fakt, że funkcja falowa całego układu nie musi być antysymetryczna przy zamianie dowolnych dwóch fermionów, lecz tylko fermionów tego samego typu. Degeneracja w granicy $g \rightarrow \infty$ jest konsekwencją różnego sposobu zantysymetryzowania funkcji falowej pomiędzy fermionami różnego typu. Wśród wszystkich stanów wyróżnia się klasa stanów całkowicie antysymetrycznych ze względu na zamianę dowolnych dwóch cząstek: są to tzw. stany Girardeau (odpowiadają im poziome linie na rysunku 3.1a). Stan Girardeau można skonstruować za pomocą wyznacznika Slatera dla $N = N_{\downarrow} + N_{\uparrow}$ fermionów. Konstrukcja jest możliwa, ponieważ dla cząstek o tych samych masach kształty orbitali jednocząstkowych $\phi_{i\downarrow}(x)$ oraz $\phi_{i\uparrow}(x)$ są takie same.

Podobna analiza widma dla układu cząstek o różnych masach ukazuje jakościowe różnice w stosunku do układu o równych masach. Aby zilustrować te różnice, na rysunkach 3.1a oraz 3.1b porównujemy widma hamiltonianu (2.5) dla mieszaniny fermionów o równej masie $\mu = 1$ oraz dla mieszaniny litu oraz potasu $\mu = 40/6$ używanej w eksperymentach [89, 90]. Widma są przedstawione dla układu $N_{\uparrow} = 3$, $N_{\downarrow} = 1$ fermionów w funkcji oddziaływania g . Pierwszą widoczną różnicą jest to, że w granicy silnego odpychania degeneracja stanów własnych jest częściowo zniesiona. W tym miejscu warto dodać, że wyniki numeryczne wskazują, że ten efekt nie zależy od liczby cząstek. Ze względu na dużą złożoność obliczeniową problemu zbadano układy, któ-



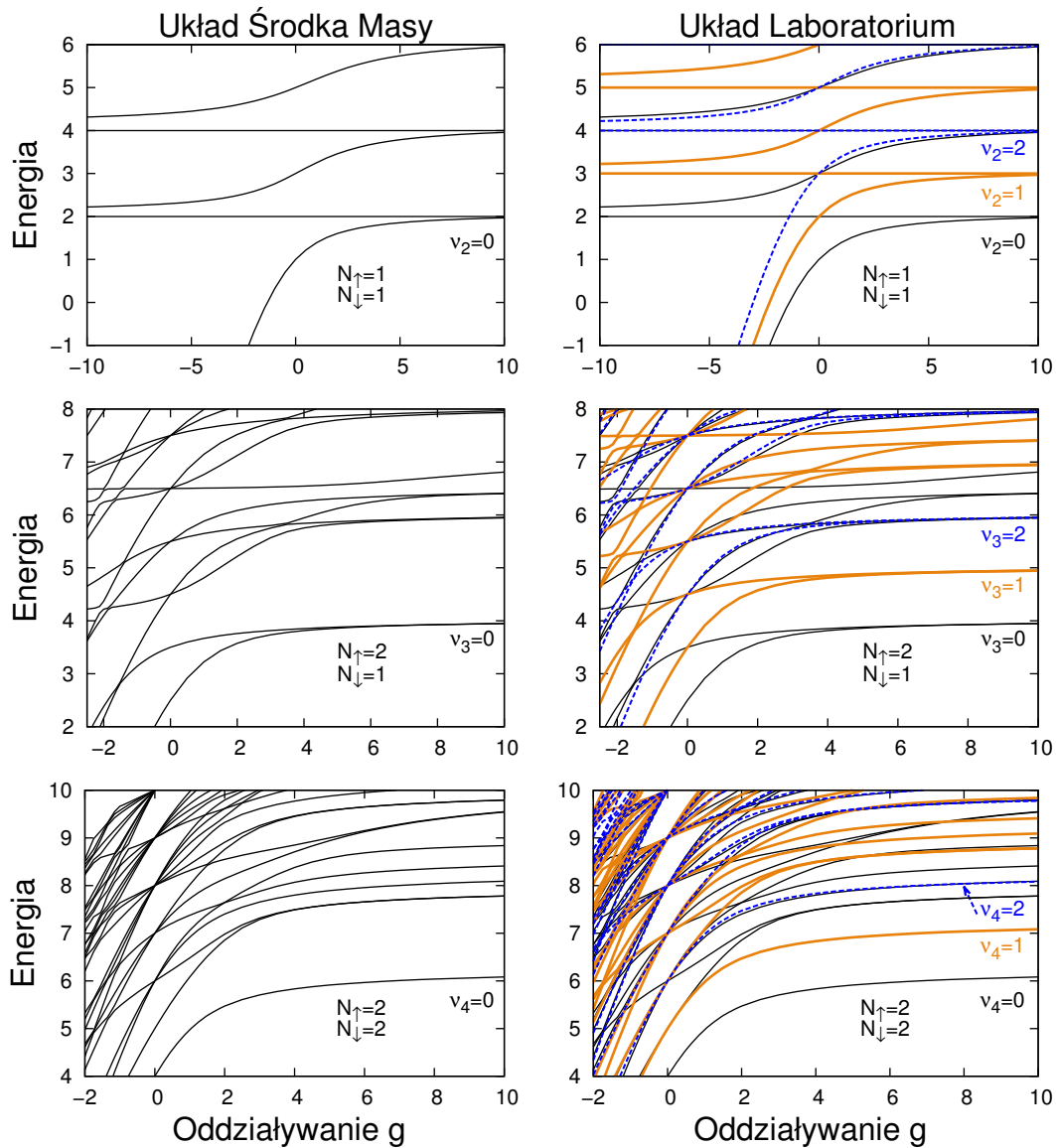
Rysunek 3.2: Widma fermionów o tej samej masie ($\mu = 1$) w funkcji oddziaływania g dla różnych liczb cząstek, $N_{\uparrow}, N_{\downarrow}$. Lewe panele ukazują widmo w układzie środka masy. Są one następnie użyte do zbudowania pełnego widma (czyli widmo w układzie laboratoryjnym) zaprezentowanego w prawych panelach. Czarna linia odpowiada stanowi podstawowemu środka masy ($v_1 = 0$), pomarańczowa pierwszemu stanowi wzbudzonemu ($v_1 = 1$), a niebieska przerywana drugiemu stanowi wzbudzonemu środka masy ($v_1 = 2$). Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_1}$.

rych suma cząstek nie przekracza $N_{\uparrow} + N_{\downarrow} \leq 10$. W zależności od konkretnych liczb N_{σ} wymiar degeneracji oraz sposób w jaki jest zniesiona są inne.

Na przykładzie rysunku 3.1c można zauważyć jak degeneracja zostaje znoszona w granicy silnego oddziaływania $g = 8$, gdy zmienia się stosunek mas μ . Dla równych mas ($\mu = 1$) cztery najniższe stany wielociałowe mają podobną energię (zaznaczono je na czerwono na rysunku 3.1c). Zwiększając parametr μ widzimy, że energia własna dwóch niższych stanów spada, a pozostałych dwóch (o niemal tej samej energii) gwałtownie wzrasta. Jest to spowodowane zmianą kształtów jednocząstkowych funkcji falowych $\phi_{i\sigma}$ i dominowania oddziaływania kontaktowego.

W pełnym widmie hamiltonianu \hat{H} można obserwować pewne regularności, ale w zasadzie trudno powiedzieć, które stany własne różnią się tylko wzbudzeniami środka masy. Aby rozwiązać ten problem zastosujemy procedurę odfiltrowania wzbudzeń środka masy. Wyniki uzyskane dla mieszanin fermionów o tej samej masie ($\mu = 1$) są przedstawione na rysunku 3.2. Widmo ukazane na lewych panelach przedstawia stany własne hamiltonianu \hat{H} będące w stanie podstawowym środka masy (górny lewy panel odtwarza wyniki dla $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 1$ uzyskane analitycznie w [28]). Przez przesunięcie tego widma o $\hbar\omega, 2\hbar\omega, \dots$ można odtworzyć pełne widmo układu (pokazane na prawych panelach rysunku 3.2), które jest znane w literaturze [62, 63]. Zwiększając liczbę cząstek, widmo staje się coraz bardziej skomplikowane. Nawet po uproszczeniu widma metodą filtrowania wzbudzeń środka masy, widmo ma złożoną strukturę z powodu wzrastającej liczby stopni swobody ruchu względnego (lewy dolny panel na rysunku 3.2).

W celu przypisania odpowiednim stanom własnym liczb kwantowych v_1 związanych ze wzbudzeniami środka masy, użyjemy metody odfiltrowania widma. Lewe panele na rysunku 3.3 ukazują widmo w układzie środka masy. Przesunięcie widma o $\hbar\omega, 2\hbar\omega, \dots$ prowadzi bezpośrednio do otrzymania pełnego widma wielociałowego (prawe panele). Widma w układzie środka masy dla różnych mas różnią się jakościowo od widm układów o równej masie. Jedynym wyjątkiem jest przykład dwóch ciał, gdzie jak wykazano wcześniej, widmo cząstek o różnych masach można wyznaczyć z widma układu o równych masach $\mu = 1$. Fakt ten jest widoczny, gdy porównamy lewe górne wykresy na rysunku 3.2 oraz na rysunku 3.3. Jeden wykres możemy otrzymać z drugiego skalując oddziaływanie $g \rightarrow g\sqrt{\mu/(1+\mu)}$. Inną ważną konsekwencją różnych mas jest brak całkowicie antysymetrycznych stanów własnych (znanych jako stany Girardeau). Mechanizm niszczenia tych stanów można zrozumieć następująco. Zmiana masy jednego ze składników skutkuje zmianą kształtu orbitali jednocząstkowych (zwiększenie masy skutkuje bardziej zlokalizowanymi funkcjami falowymi). W związku z tym nie można utworzyć stanów całkowicie antysymetrycznych za pomocą wyznacznika Slatera, z powodu braku symetrii zamiany jednych cząstek na drugie.



Rysunek 3.3: Widma układu fermionów o różnych masach ($\mu \neq 1$) w funkcji oddziaływania g dla różnej liczby cząstek, $N_{\uparrow}, N_{\downarrow}$. Lewe panele odpowiadają widmu w układzie środka masy. Są one użyte do skonstruowania pełnego widma ukazanego na prawych panelach. Czarna linia odpowiada stanowi podstawowemu środka masy ($v_1 = 0$), pomarańczowa linia pierwszemu stanowi wzbudzonemu ($v_1 = 1$), a niebieska przerywana linia odpowiada drugiemu stanowi wzbudzonemu środka masy ($v_1 = 2$). Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_1}$.

3.4 Korelacje dwuciałowe

Jeden z postulatów mechaniki kwantowej mówi, że cała informacja o stanie układu jest zakodowana w jego funkcji falowej. Niestety, funkcja falowa może mieć bardzo skomplikowaną formę, zwłaszcza dla stanów wielociałowych, z powodu posiadania wielu stopni swobody. W praktyce dużo łatwiej jest badać prostsze wielkości takie jak energia, profil gęstości jednociałowej czy korelacje niższego rzędu [19–27]. Ścisły związek z doświadczeniem motywuje nas jeszcze bardziej, aby przeanalizować zagadnienie korelacji w układzie kilku cząstek.

Funkcją korelacji, na której się skupimy, będzie najprostsza korelacja zawierająca informację o obu składnikach. W szczególności analizujemy własności układu zapisane w profilu gęstości par (zdefiniowanej wzorem (2.22))

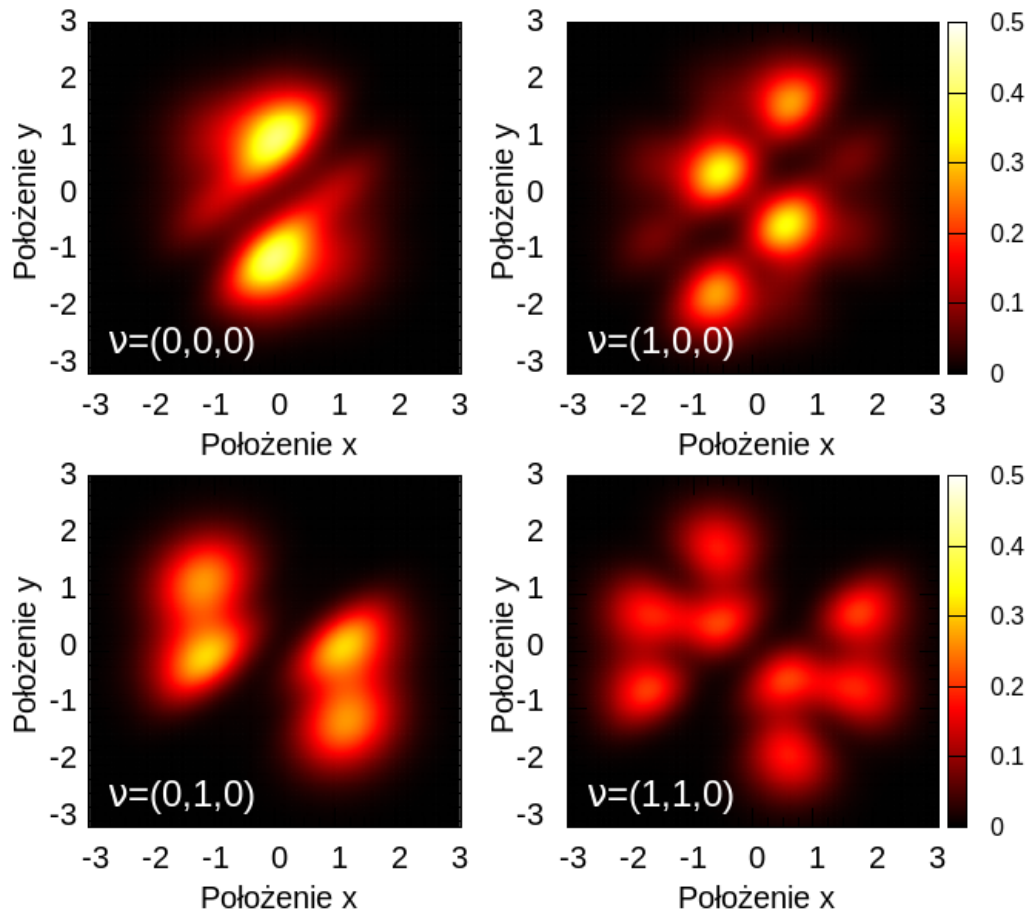
$$C(x, y) = \langle \psi | \hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(x) \hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(y) \hat{\Psi}_\uparrow(y) \hat{\Psi}_\uparrow(x) | \psi \rangle,$$

tzn. w diagonalnej części zredukowanej dwuciałowej macierzy gęstości.

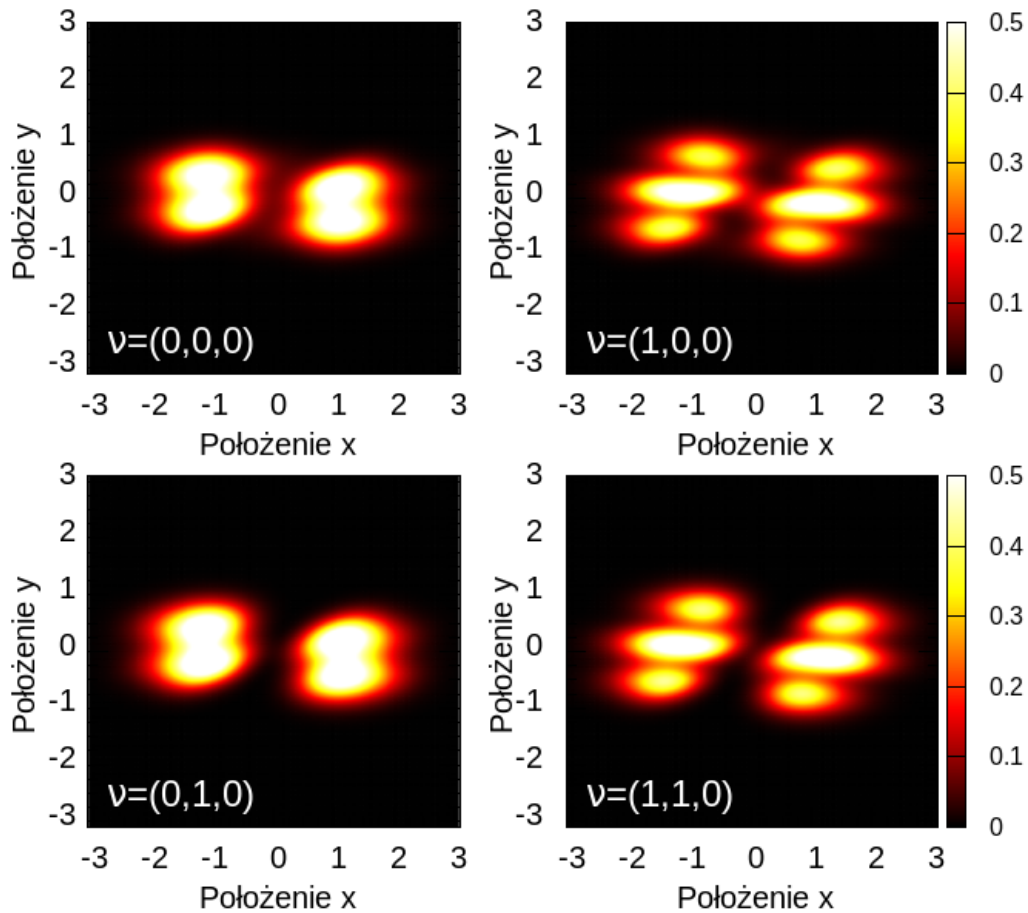
Na rysunku 3.4 przedstawiony jest profil gęstości par wyznaczony dla stanu podstawowego i kilku stanów wzbudzonych w układzie $N_\uparrow = 2, N_\downarrow = 1$ cząstek oraz dla oddziaływania $g = 3$. Lewa kolumna odpowiada stanom, które są w stanie podstawowym środka masy ($\nu_1 = 0$), ale różnią się wzbudzeniem zmiennej względnej. Prawe panele różnią się od lewych jednym wzbudzeniem środka masy ($\nu_1 = 1$). Można zauważyć, że kształty profili gęstości par pokazane na rysunku 3.4 różnią się. W szczególności lewe panele zdecydowanie różnią się od prawych, mimo że mają takie same wzbudzenia zmiennej względnej. To oznacza, że trywialne, bo nie zależące od oddziaływania, wzbudzenia środka masy całkowicie zmieniają kształt profili gęstości par. Wynika z tego, że na podstawie uzyskanych w doświadczeniu korelacji dwuciałowych może być trudno klasyfikować profile gęstości według wzbudzeń zmiennej względnej.

Problem klasyfikacji stanów jest jeszcze trudniejszy w przypadku, gdy masy fermionów są różne. Profil gęstości par dla stosunku mas $\mu = 5$ jest pokazany na rysunku 3.5. W tym wypadku, w przeciwieństwie do przypadku równych mas, stany własne charakteryzujące się tą samą wartością liczby kwantowej ν_1 , a różniące się tylko względnym wzbudzeniem, mają prawie te same profile gęstości par. Lewe panele na rysunku 3.5 odpowiadają stanowi podstawowemu, a prawe pierwszemu stanowi wzbudzonemu środka masy. Wzbudzenia ruchu względnego zmieniają jedynie nieznacznie profil gęstości par. W konsekwencji te stany są praktycznie nierozróżnialne. Dodatkowo, stany są prawie zdegenerowane, co widać na rysunku 3.3. Jedyną wielkość, która rozróżnia te stany, to różne wzbudzenia środka masy. Choć nie jest to widoczne od razu, informacja o wzbudzeniu zmiennej względnej jest zakodowana w profilu gęstości par. Tę ukrytą informację da się wyznaczyć bezpośrednio z doświadczalnie mierzonych profili gęstości par.

Wydobycie tej informacji jest możliwe, ponieważ w układzie opisanym hamiltonianem (2.5) można odseparować pewne stopnie swobody. Odseparowanie środka masy od wewnętrznych



Rysunek 3.4: Profil gęstości par dla kilku najniższych stanów własnych układu $N_1 = 2, N_1 = 1$ cząstek w przypadku równych mas ($\mu = 1$) oraz oddziaływania $g = 3$. Lewy panel odpowiada stanowi podstawowemu środka masy ($\nu_1 = 0$), podczas gdy prawy panel ukazuje pierwszy stan wzbudzony środka masy ($\nu_1 = 1$). Górne i dolne rzędy pokazują odpowiednio stan podstawowy ($\nu_2 = 0$) i pierwszy stan wzbudzony ($\nu_2 = 1$) w zmiennych względnych. Położenia i gęstość dwuciałowa są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar}/(m_1\omega)$ oraz $m_1\omega/\hbar$.



Rysunek 3.5: Profil gęstości par dla kilku najniższych stanów własnych układu $N_1 = 2, N_1 = 1$ cząstek dla stosunku mas $\mu = 5$ oraz oddziaływania $g = 3$. Lewy panel odpowiada stanowi podstawowemu środka masy ($v_1 = 0$), podczas gdy prawy panel przedstawia pierwszy stan wzbudzony środka masy ($v_1 = 1$). Górny i dolny rząd ukazują odpowiednio stan podstawowy ($v_2 = 0$) oraz pierwszy stan wzbudzony ($v_2 = 1$) we współrzędnej względnej. Położenia i gęstość dwuciałowa są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_1\omega)}$ oraz $m_1\omega/\hbar$.

stopni swobody oznaczają, że funkcja falowa każdego stanu może być zapisana jako iloczyn:

$$\Psi(x_1, \dots, x_{N_\uparrow}, y_1, \dots, y_{N_\downarrow}) = \Psi(R_{\text{CM}})\Psi(r_1, r_2, \dots, r_{N-1}), \quad (3.13)$$

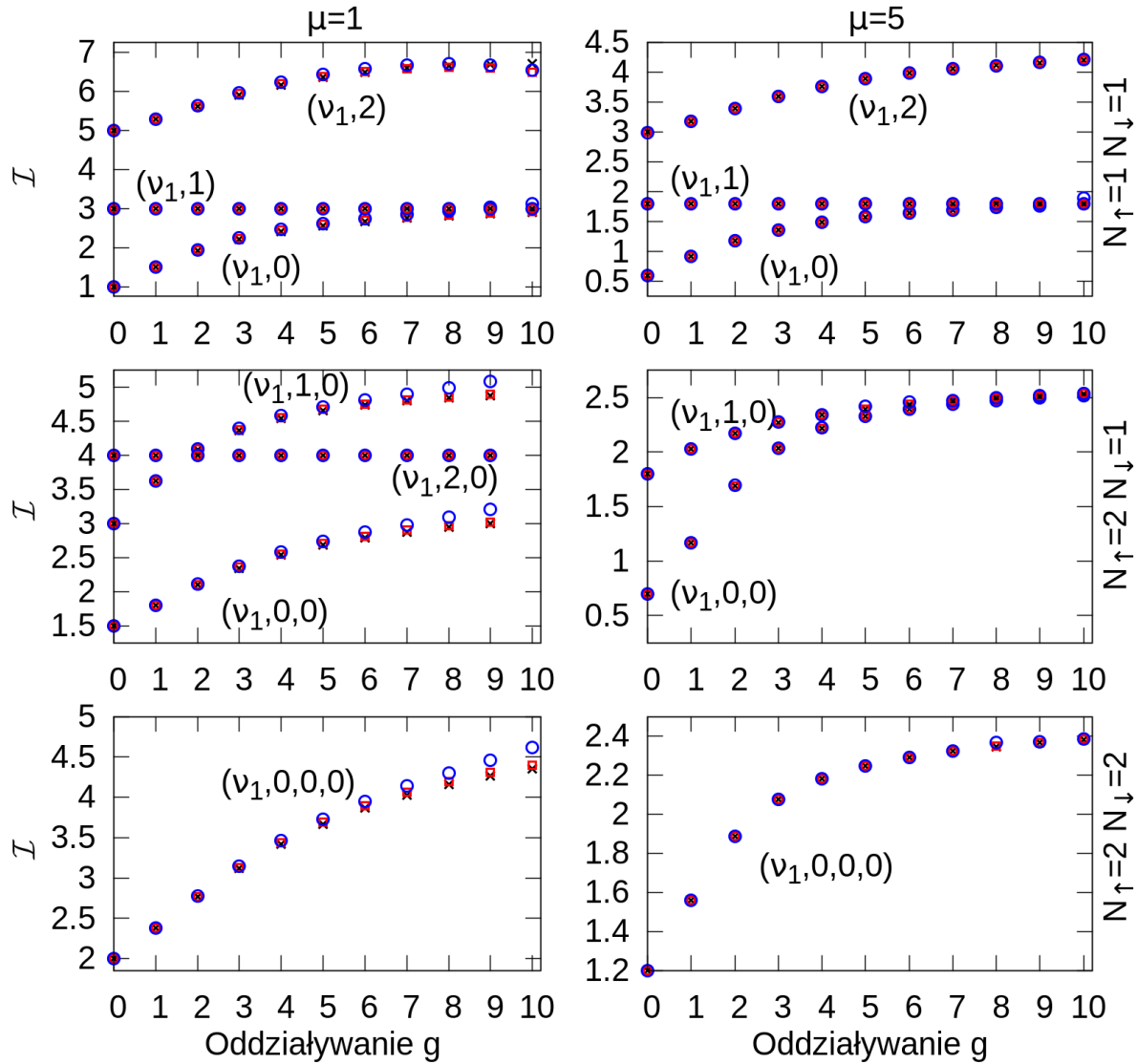
gdzie R_{CM} oznacza współrzędną środka masy, a r_1, r_2, \dots, r_{N-1} są pewnymi ogólnymi współrzędnymi względnymi. Ze wszystkich możliwych kombinacji różnic położeń postaci $x_i - y_j, x_i - x_j$ oraz $y_i - y_j$, tylko $N_\uparrow + N_\downarrow - 1$ zmiennych jest niezależnych. To oznacza, że jest duża dowolność w wyborze współrzędnych względnych. Odległość $r_1 = x_1 - y_1$ między parą fermionów różnego typu jest bardzo wygodną współrzędną, która ma prostą interpretację fizyczną.

Aby zbadać informację ukrytą w korelacjach dwuciałowych, rozważmy drugi moment profilu gęstości par, który jest zdefiniowany następująco:

$$\mathcal{I} = \int C(x_1, y_1)(x_1 - y_1)^2 dx_1 dy_1. \quad (3.14)$$

Można bezpośrednio pokazać, że wielkość ta nie zależy od położenia środka masy układu R_{CM} , tzn. jest nieczuła na wzbudzenia środka masy cząstek. Wynika stąd, że tak długo jak stany własne hamiltonianu (2.2) mają te same wartości liczb kwantowych związanych ze względnymi stopniami swobody ($v_2, v_3 \dots v_N$), powinny mieć także te same wartości wielkości \mathcal{I} . Ponieważ \mathcal{I} jest niezmiennicza względem wzbudzeń środka masy, możliwe jest poklasyfikowanie wszystkich stanów własnych układu ze względu na wzbudzenia ruchu względnego.

W celu pokazania, że niezmiennik \mathcal{I} doskonale nadaje się do klasyfikacji stanów własnych, obliczone zostały wartości \mathcal{I} dla szerokiego zakresu parametrów (stosunków mas μ , liczby cząstek N_\uparrow, N_\downarrow oraz siły oddziaływania g). Wyniki są przedstawione na rysunku 3.6. Kolejne stany własne wzbudzeń środka masy $v_1 = 0, 1$ oraz 2 są zaznaczone odpowiednio czarnymi krzyżami, czerwonymi kwadratami oraz niebieskimi okręgami. Zgodnie z oczekiwaniami dla danego zestawu liczb kwantowych opisujących ruch względny (v_2, v_3, \dots, v_N), wielkość \mathcal{I} nie zależy od wzbudzeń środka masy. Oznacza to, że dla zadanego oddziaływania g krzyże, kwadraty oraz okręgi na rysunku 3.6 są położone w tym samym punkcie. Rozbieżności widoczne dla silnych oddziaływań g , zwłaszcza dla przypadku równych mas $\mu = 1$ (lewe panele na rysunku 3.6), są związane z metodą numeryczną, a ściślej rzecz biorąc ze skończonym rozmiarem bazy jednociąłowej. Odchylenia mogą być zmniejszone przez zwiększenie parametru obciążenia N_{MAX} kosztem czasu wykonywanych obliczeń. Ponieważ w układzie o różnej masie orbite jednociąłowe mają kształt zależny od rozważanego rodzaju fermionów σ , numeryczny błąd dla $\mu = 5$ jest mniejszy niż dla równych mas $\mu = 1$ (odpowiednio prawa i lewa kolumna na rysunku 3.6). Niezmiennik \mathcal{I} rośnie monotonicznie wraz ze wzrostem oddziaływania g . Takiego zachowania funkcji można się spodziewać, ponieważ niezmiennik \mathcal{I} , co wynika z definicji (3.14), jest wielkością, która mierzy średnią odległość między fermionami \downarrow i \uparrow . Odległość ta musi się zwiększać, gdy wzrasta odpychanie w układzie. Są od tego wyjątki, a mianowicie całkowicie antysymetryczne



Rysunek 3.6: Niezmiennik \mathcal{I} w funkcji siły oddziaływania g dla różnych stanów własnych opisanych liczbami kwantowymi $(v_1; v_2, \dots, v_N)$. Lewa kolumna ukazuje wyniki dla przypadku równych mas ($\mu = 1$), podczas gdy prawa dla różnych mas ($\mu = 5$). Kolejne rzędy przedstawiają wyniki dla różnej liczby cząstek ($N_{\uparrow} + N_{\downarrow} = 2, 3, 4$). Czarne krzyże odpowiadają stanom ze środkiem masy w stanie podstawowym ($v_1 = 0$), czerwone kwadraty stanom o jednym wzbudzeniu środka masy ($v_1 = 1$), a niebieskie okręgi odpowiadają stanom z podwójnym wzbudzeniem środka masy ($v_1 = 2$). Niezmiennik \mathcal{I} dany jest w jednostkach $\hbar/(\omega m_1)$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3 \omega / m_1}$.

stany Girardeau, które nie zależą od oddziaływania g . W tych stanach, z powodu antysymetrii funkcji falowej ze względu na zamianę jakichkolwiek dwóch cząstek, energia oddziaływania kontaktowego znika i prowadzi do stałej wartości \mathcal{S} . Korzystając z monotoniczności niezmiennika \mathcal{S} w funkcji oddziaływania g i tego, że funkcja falowa dla układu nieoddziałującego oraz nieskończenie silnie oddziałującego jest często znana, można wyznaczyć graniczne wartości \mathcal{S}_0 oraz \mathcal{S}_∞ dla konkretnego stanu własnego. Dla skończonej wartości oddziaływania g musi zachodzić nierówność $\mathcal{S}_0 < \mathcal{S}_g < \mathcal{S}_\infty$.

Na koniec, zwróćmy uwagę że jest możliwe zdefiniowanie innych niezmienników związanych bezpośrednio z korelacjami wielociałowymi. Na przykład, zamiast rozważania wielkości \mathcal{S} , można rozważać wielkość \mathcal{M} związaną z szerokością rozkładu środka masy w stanie własnym $|\psi_i\rangle$:

$$\mathcal{M} = \langle \psi_i | \hat{R}_{\text{CM}}^2 | \psi_i \rangle. \quad (3.15)$$

Wielkość ta, w przeciwieństwie do \mathcal{S} , jest niezmiennicza ze względu na obecność wzbudzeń we współrzędnych względnych, tzn. nie zależy od liczb kwantowych (v_2, v_3, \dots, v_N) . Stąd, może być używana jako wskaźnik wzbudzeń środka masy, będąc niewrażliwa na wzbudzenia wewnętrznych stopni swobody. O ile \mathcal{S} zależy tylko od dwuciałowego profilu gęstości par, nowa wielkość \mathcal{M} zależy także od jednociiałowych gęstości oraz od dwuciałowych profili gęstości par fermionów tego samego typu:

$$\mathcal{M} = \sum_{\sigma} N_{\sigma} \mu_{\sigma}^2 \int \rho_{\sigma}(x) x^2 dx + \sum_{\sigma} N_{\sigma} (N_{\sigma} - 1) \int C_{\sigma\sigma}(x, x') x x' dx dx' + \mu N_{\uparrow} N_{\downarrow} \int C(x, y) dx dy, \quad (3.16)$$

gdzie $\mu_{\uparrow} = 1$ oraz $\mu_{\downarrow} = \mu$. Profil gęstości par tego samego rodzaju fermionów na stanie $|\psi_i\rangle$ jest zdefiniowana analogicznie do (2.22):

$$C_{\sigma\sigma}(x, x') = \langle \psi_i | \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(x') \hat{\Psi}_{\sigma}(x') \hat{\Psi}_{\sigma}(x) | \psi_i \rangle. \quad (3.17)$$

Ponieważ niezmiennik \mathcal{M} zależy od wszystkich trzech możliwych profili gęstości dwuciałowej, wydaje się być mniej praktyczną wielkością niż \mathcal{S} .

Zauważmy, że wyniki zaprezentowane w tym rozdziale mogą być także ważne w przypadku potencjałów różniących się od oscylatora harmonicznego. Wtedy ruch środka masy jest sprzężony do ruchu względnego cząstek, a to prowadzi do bardzo ciekawych zjawisk znanych jako *Inelastic Confinement-Induced Resonances*, które były ostatnio badane zarówno teoretycznie jak i doświadczalnie [91–93].

Fakt, że część ważnych informacji o stanach własnych może być wydobyta z doświadczalnie dostępnych korelacji pochodzi z możliwości odseparowania ruchu środka masy. Metoda przedstawiona w tym rozdziale może być bardzo łatwo uogólniona na dwuskładnikowe mieszaniny bozonów lub mieszaniny fermionowo-bozonowe oraz na oddziaływanie długozasięgowe, o ile

ich postać pozwala na odseparowanie ruchu środka masy.

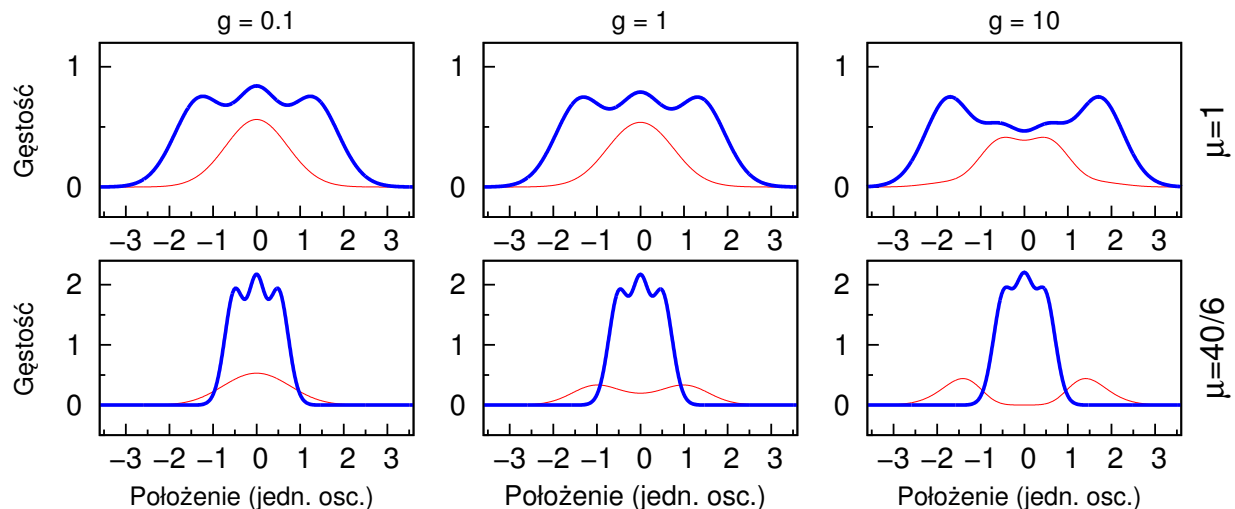
Rozdział 4

Separacja profilu gęstości indukowana różnicą mas

4.1 Własności stanu podstawowego

Wyniki poprzedniego rozdziału jednoznacznie pokazują, że różnica mas między atomami poważnie wpływa na postać widma energetycznego układu kilku atomów oraz na postać profilu korelacji par. Profil gęstości jednociąłowej (2.21) jest wielkością, która dostarcza informacji o rozkładzie przestrzennym cząstek i można mierzyć ją doświadczalnie. Z tego powodu ten rozdział, oparty na pracy [2], będzie poświęcony wpływowi różnicy mas na własności profilu gęstości mieszaniny fermionów.

Aby mieć punkt odniesienia, analizę zaczniemy od stanu podstawowego układu opisanego hamiltonianem (3.1), gdy masy obu rodzaju fermionów są równe $\mu = 1$. Tym samym odtworzymy wyniki teoretyczne uzyskane w grupie Nikolaja Zinnera [69], gdzie układ fermionów o równych masach został poddany analizie. W pracy tej pokazano, że odpychanie pomiędzy fermionami różnych typów prowadzi do separacji profili gęstości, gdy w układzie występuje asymetria w liczbie cząstek, tzn. $N_{\uparrow} \neq N_{\downarrow}$. W szczególności, autorzy zbadali oddziaływanie jednej cząstki ($N_{\downarrow} = 1$) z całym morzem Fermiego cząstek drugiego typu ($N_{\uparrow} > 1$). Badania były przeprowadzone dla różnej liczby cząstek ($N_{\uparrow} = 3, 6, 9$). Analogiczne obliczenia powtórzone za pomocą metody ścisłej diagonalizacji w pracy [2], a gęstość jednociąłowa (2.21) uzyskana w ten sposób dla układu $N_{\uparrow} = 3, N_{\downarrow} = 1$ jest przedstawiona na górnej części rysunku 4.1. Dla równych mas i w granicy silnego oddziaływania fermiony, których jest więcej są wypychane ze środka pułapki harmoniczej. Natomiast fermion typu \downarrow znajduje się w samym środku pułapki z prawie niezmienną gęstością jednociąłową. Zwiększanie siły oddziaływania g prowadzi do formowania się dwóch domen „spinowych”. Warto zauważyć, że profile gęstości składników są niemal identyczne dla słabego oddziaływania $g = 1$ oraz dla prawie nieoddziałującego układu $g = 0.1$. Metoda użyta w [69] charakteryzuje się lepszą dokładnością dla silnych oddziaływań, a gorszą



Rysunek 4.1: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\uparrow}(x)$ (gruba niebieska linia, ciężkie fermiony) oraz $\rho_{\downarrow}(x)$ (cienka czerwona linia, lekkie fermiony) wyznaczona dla stanu podstawowego układu dla różnych wartości oddziaływania g oraz stosunku mas μ ($N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 1$). Dla słabych oddziaływań, jednocząstkowa gęstość odtwarza wynik dla gazu idealnego dla obu typów fermionów. Gdy oddziaływanie jest wystarczająco silne, w układzie występuje separacja gęstości. Położenia i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ oraz $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.

dla słabych, więc jest komplementarna do metody ścisłej diagonalizacji [2]. Wyniki otrzymane metodą ścisłej diagonalizacji dla oddziaływania $g = 10$ są nie do odróżnienia od wyników uzyskanych w pracy [69] dla bardzo silnego oddziaływania $g = 100$. Z porównania powyższych rezultatów otrzymanych dwoma metodami wynika, że funkcja falowa uzyskana metodą ścisłej diagonalizacji dla oddziaływania $g = 10$ niewiele się różni od prawdziwej funkcji falowej dla nieskończenie silnych oddziaływań. Dla równych mas $\mu = 1$ separacja w stanie podstawowym jest obecna tylko gdy różne są liczby cząstek ($N_{\uparrow} \neq N_{\downarrow}$) i pojawia się zawsze w składniku z wyższą liczbą cząstek N_{σ} . W pracy [94] pokazano, że prawdopodobieństwo znalezienia fermionów mniej liczebnych w środku pułapki zmniejsza się wolniej niż tych o wyższej liczebności. To jest powód, dla którego ten mechanizm separacji wymaga różnej liczby cząstek obu rodzajów.

Mechanizm separacji indukowanej przez różnicę mas jest fundamentalnie różny od mechanizmu separacji opisanej w [69]. Szczegółowe obliczenia zostały przeprowadzone dla układu, w którym stosunek mas wynosi $\mu = 40/6$ (dolny rząd na rysunku 4.1). Nawet dla prawie nieoddziałujących cząstek, czyli gdy porównamy wykresy w pierwszej kolumnie rysunku 4.1, profile gęstości znacznie się różnią. Jednak różnica ta wynika bezpośrednio z większej lokalizacji cięższych cząstek, tzn. z faktu, że ich funkcje falowe są odpowiednio węższe. Trywialne skalowanie amplitudy profilu gęstości $\sqrt{\mu}$ oraz szerokości przez $1/\sqrt{\mu}$ doprowadzi do kształtu profilu gęstości odpowiedniego dla cząstek o równej masie. Jednak gdy zwiększymy odrobinę oddziaływanie (środkowa kolumna), zobaczymy że profil gęstości lżejszej, pojedynczej cząstki zaczyna się roz-

dzielać na dwie części. Natomiast profil gęstości cięższych cząstek pozostaje w środku prawie się nie zmieniając. W granicy silnego oddziaływania efekt ten jest jeszcze bardziej widoczny. Separacja profilu gęstości przebiega zatem inaczej niż w przypadku mieszaniny o równych masach.

Dla układów o różnych masach ($\mu \neq 1$) mechanizm separacji jest konsekwencją różnych kształtów stanów jednocząstkowych $\phi_{i\downarrow}$ oraz $\phi_{i\uparrow}$. Układ nie jest symetryczny względem zamiany cząstek, z czego wynika że energie oddziaływania pomiędzy cząstkami obsadzającymi różne poziomy oscylatora harmonicznego także nie są symetryczne. Ten prosty fakt prowadzi bezpośrednio do zjawiska separacji w składniku o mniejszej masie. Aby w pełni wyjaśnić mechanizm, skoncentrujemy się na przypadku $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 1$ cząstek. W granicy znikającego oddziaływania, stan podstawowy układu ma postać¹:

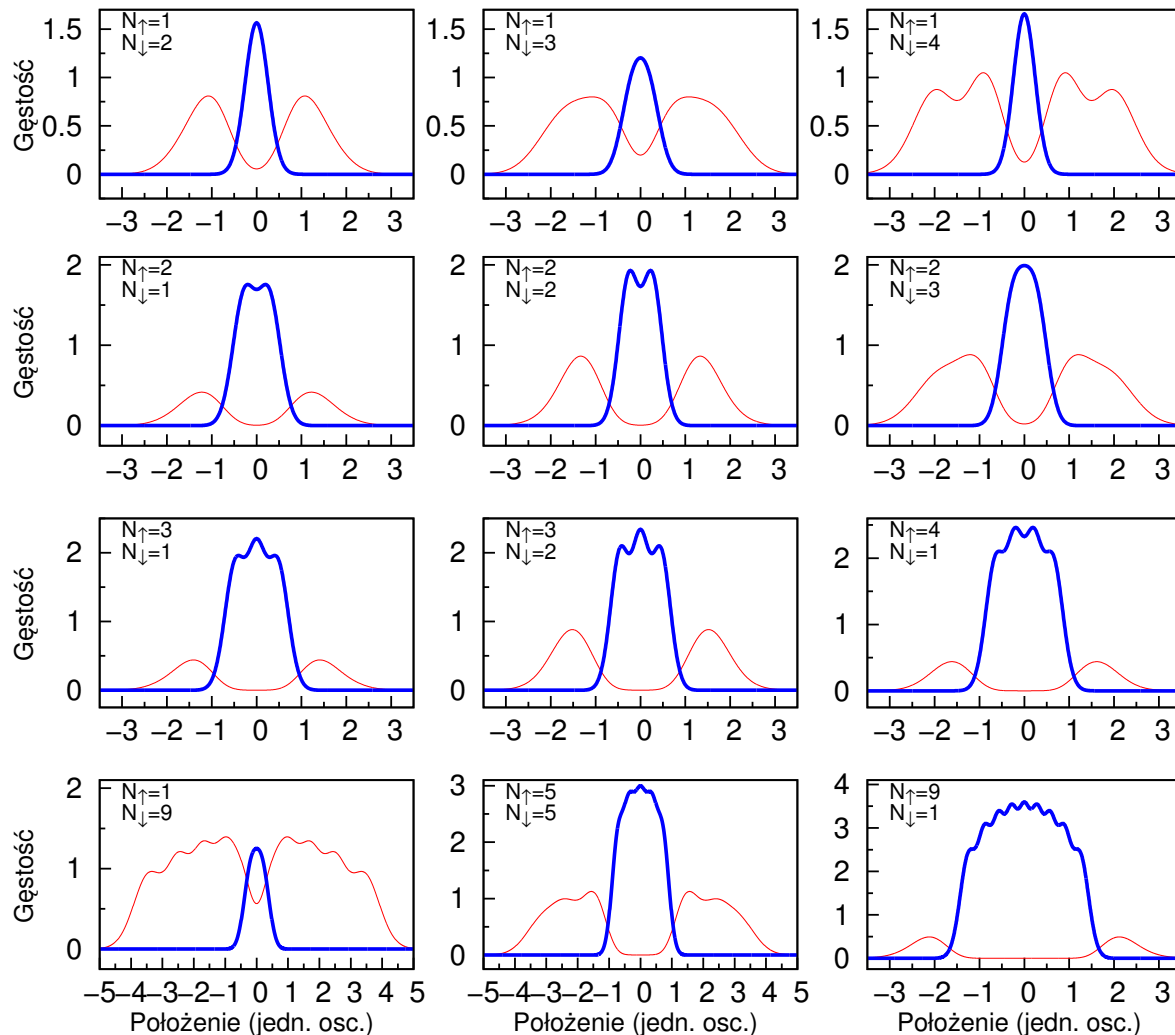
$$|210;0\rangle \equiv 1/\sqrt{6} \hat{a}_{2\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{0\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{0\downarrow}^{\dagger} |\text{vac}\rangle. \quad (4.1)$$

Gdy oddziaływanie jest obecne, cząstki o różnym typie starają się unikać, aby zminimalizować energię oddziaływania i w konsekwencji zmieniają swoją konfigurację w bazie Focka. Energia oddziaływania może być zminimalizowana poprzez wzbudzenie cząstki do wyższego stanu jednocząstkowego. W badanym modelu, w którym częstość oscylatora ω dla obu cząstek jest taka sama, energia wzbudzenia nie zależy od typu cząstki i wynosi $\hbar\omega$ zarówno dla lżejszego jak i cięższego fermionu. Różne masy wpływają natomiast na własności przestrzenne (większa lokalizacja cięższych cząstek), co powoduje, że układ $N_{\downarrow} = 3, N_{\uparrow} = 1$ cząstek ma inne własności od układu $N_{\downarrow} = 1, N_{\uparrow} = 3$. Fermiony różnią się rozkładem przestrzennym, co przekłada się bezpośrednio na energie oddziaływania i faworyzuje wzbudzenia lżejszych cząstek ze względu na ich większe rozmycie. W konsekwencji stany Focka typu $|210;k\rangle \equiv 1/\sqrt{6} \hat{a}_{2\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{0\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{k\downarrow}^{\dagger} |\text{vac}\rangle$ z $k > 0$ zaczynają wnosić wkład i dominować w wielociałowym stanie podstawowym układu.

Dokładne badanie stanu podstawowego otrzymanego z metody ścisłej diagonalizacji dowodzi, że ta heurystyczna argumentacja jest poprawna. Na przykład dla silnego oddziaływania $g = 10$ i dużej różnicy mas $\mu = 40/6$ rzut stanu podstawowego $|\psi_0\rangle$ na stan podstawowy nieoddziałującego układu wynosi $|\langle 210;0|\psi_0\rangle|^2 < 10^{-4}$. Jednocześnie całkowite prawdopodobieństwo znalezienia wszystkich trzech ciężkich cząstek w stanie najniższym stanie wynosi $\sum_k |\langle 210;k|\psi_0\rangle|^2 \approx 0.9$. To oznacza, że energia stanu podstawowego jest minimalizowana głównie dzięki ruchliwości lżejszej cząstki tzn. temu, że lżejsza cząstka ma szerszy rozkład przestrzenny.

Można sprawdzić, że wyżej opisany mechanizm jest bardzo ogólny i nie zależy od liczby fermionów poszczególnych typów. Na rysunku 4.2 pokazujemy jednocząstkowe profile gęstości dla różnej liczby fermionów N_{\uparrow} i N_{\downarrow} otrzymane w granicy silnego oddziaływania $g = 10$. Na wszystkich wykresach stosunek mas wynosi $\mu = 40/6$, a separacja indukowana różnicą mas zawsze

¹Korzystamy z krótszego zapisu niż w definicji (2.17), który jest bardzo wygodny, gdy wiele stanów jednociłowych jest nieobsadzonych.



Rysunek 4.2: Jednocząstkowa gęstość $\rho_\uparrow(x)$ (gruba niebieska linia, ciężkie fermiony) oraz $\rho_\downarrow(x)$ (cienka czerwona linia, lekkie fermiony) wyznaczona dla stanu podstawowego układu w granicy silnego oddziaływania $g = 10$. W przeciwieństwie do wyników uzyskanych dla równych mas $\mu = 1$, w tym przypadku separacja zawsze następuje w składniku lżejszym, bez względu na liczebność ciężkich i lekkich cząstek. W szczególności separacja ma miejsce również w przypadku równych liczb fermionów $N_\uparrow = N_\downarrow$. Położenia i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar}/(m_\downarrow\omega)$ oraz $\sqrt{m_\downarrow\omega/\hbar}$.

występuje w lżejszym składniku (cienka czerwona linia). Wyniki otrzymane dla wszystkich konfiguracji z $N_\uparrow + N_\downarrow \leq 10$ cząstkami potwierdzają, że lżejszy składnik jest zawsze dzielony na dwie domeny niezależnie od liczby fermionów. Warto nadmienić, że szczególny przypadek $N_\uparrow = 1$, $N_\downarrow = 2$ cząstek o różnych masach został przeanalizowany innymi metodami w pracy [95] i wyniki te są w pełni zgodne z wynikami uzyskanymi za pomocą metody ścisłej diagonalizacji. Niestety metoda wariacyjna użyta w tej pracy bardzo trudno się uogólnia na większą liczbę cząstek.

4.2 Własności stanu mieszanego

W tej sekcji przeanalizujemy jak niedoskonałości przygotowania układu wpływają na zaobserwowane zjawisko separacji przestrzennej profilu gęstości. Eksperymentalna realizacja stanu podstawowego jest zwykle bardzo trudna. W rzeczywistym doświadczeniu istnieje możliwość, że przygotowany układ będzie w stanie wzbudzonym, a nie podstawowym. Taką możliwość opisuje się za pomocą stanu mieszanego, którego dokładna postać zależy od konkretnego doświadczenia. W tym rozdziale założymy, że model stanu termicznego $\hat{\rho}_T$ powinien dobrze oddawać własności stanu mieszanego opisującego niedoskonałości przygotowania układu. Rozważmy zatem wielociałowy stan mieszany postaci:

$$\hat{\rho}_T = \mathcal{Z}^{-1} \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (4.2)$$

gdzie prawdopodobieństwa $p_i = \exp(-\mathcal{E}_i/k_B T)$ oznaczają wagę, z którą stan własny $|\psi_i\rangle$ daje wkład do stanu mieszanego, a $\mathcal{Z} = \sum_i p_i$ jest sumą statystyczną. Parametr „temperatury” T (mierzony w jednostkach $\hbar\omega/k_B$) może być użyty jako efektywna miara oddziaływania ze środowiskiem zewnętrznym lub miara niedoskonałości przygotowania układu. Łatwo zauważyć, że w granicy $T \rightarrow 0$ stan mieszany przechodzi w macierz gęstości stanu podstawowego $\hat{\rho}_T = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$. Po zdefiniowaniu stanu mieszanego $\hat{\rho}_T$ cała analiza może zostać przeprowadzona analogicznie jak dla stanu podstawowego $|\psi_0\rangle$, z tym że gęstość $\rho_\sigma(x)$ dla stanu mieszanego jest zdefiniowana następująco:

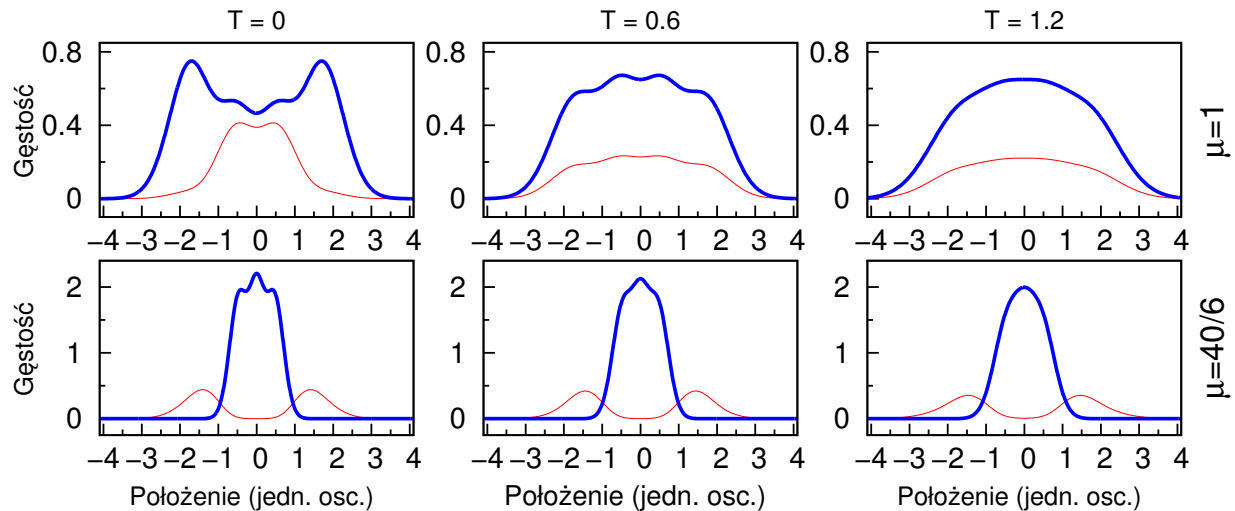
$$\rho_\sigma(x, T) = \text{Tr} \left[\hat{\rho}_T \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(x) \hat{\Psi}_\sigma(x) \right]. \quad (4.3)$$

W granicy $T \rightarrow 0$ wzór (4.3) przechodzi we wzór (2.21).

Z postaci wyrażeń na wagi p_i wynika, że największy wkład będą miały stany o niskiej energii, a wkłady od wyższych stanów wzbudzonych zanikają wykładniczo z wartością energii \mathcal{E}_i . W praktyce nieskończoną sumę (4.2) przybliżamy do skończonej liczby stanów wielociałowych, która oczywiście zależy od temperatury T . Dla ustalonej temperatury liczba stanów wielociałowych jest wyznaczona w ten sposób, że jej zwiększenie nie zmienia znacząco kształtu gęstości jednoczątkowej.

Na rysunku 4.3 pokazujemy wpływ temperatury na separację w gęstości jednociłowej dla liczby cząstek równej $N_\uparrow = 3$, $N_\downarrow = 1$ oraz silnego oddziaływania $g = 10$. Lewa kolumna przedstawia profile gęstości dla parametru $T = 0$, czyli stanu podstawowego. Jak widać, w górnym rzędzie dla układu równych mas $\mu = 1$, separacja jest niszczone od razu, gdy wyższe stany wzbudzone zaczynają istotnie uczestniczyć w stanie mieszanym układu. Profile gęstości są wygładzone, a fluktuacje gęstości przestrzennej zanikają.

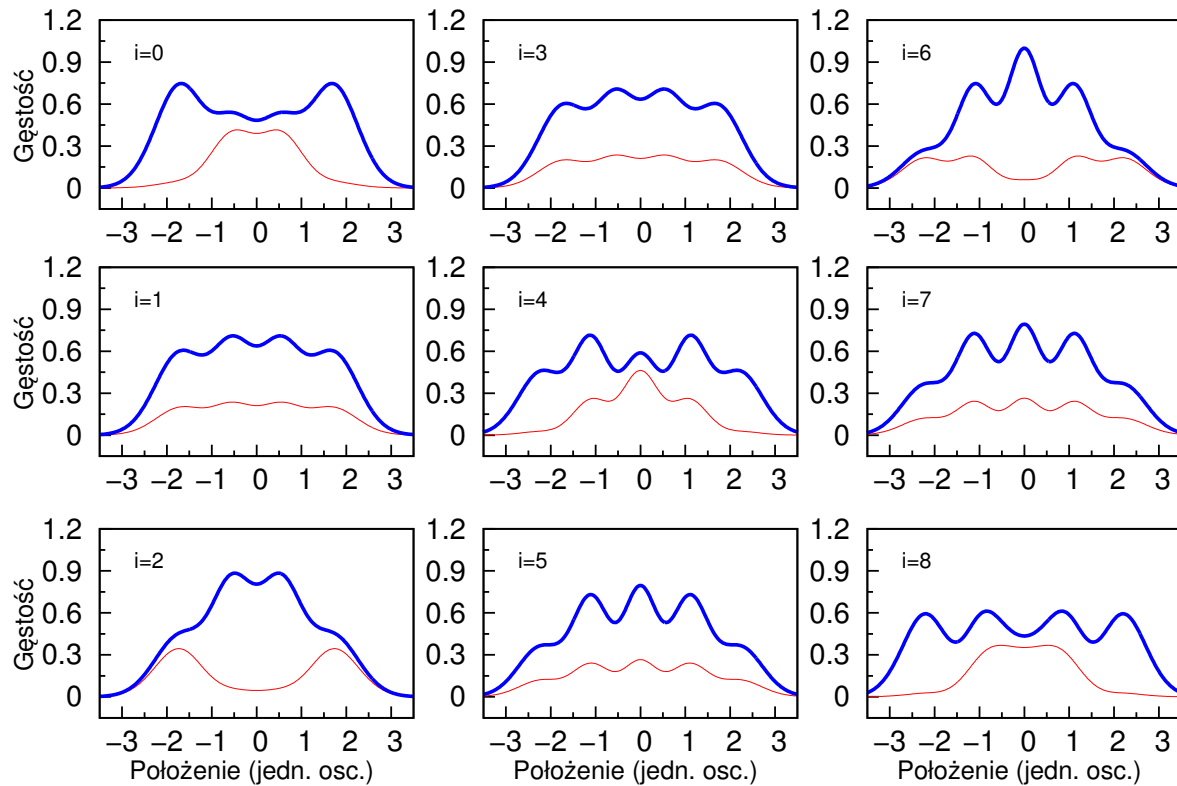
W układzie o stosunku mas $\mu = 40/6$ dzieje się coś zupełnie innego. Mianowicie, separacja indukowana przez dużą różnicę mas prawie nie jest czuła na wpływ temperatury. Jedyłą



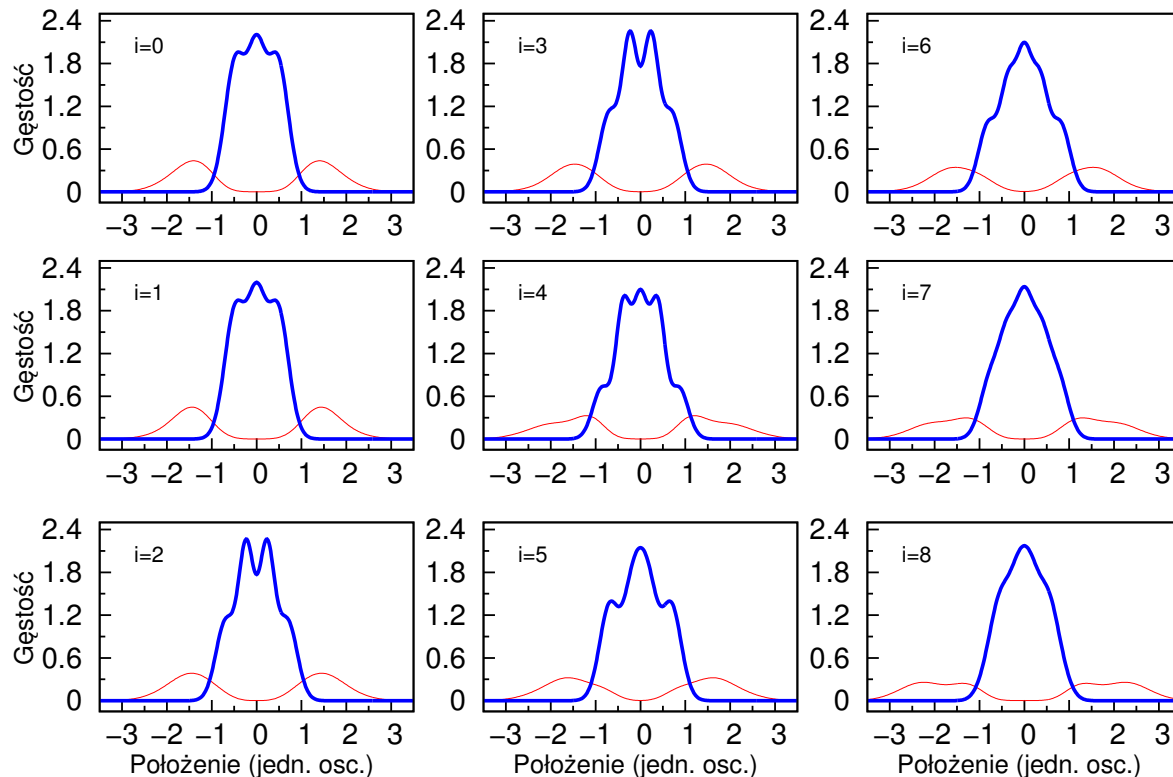
Rysunek 4.3: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\uparrow}(x)$ (gruba niebieska linia, ciężkie fermiony) oraz $\rho_{\downarrow}(x)$ (cienka czerwona linia, lekkie fermiony) wyznaczona dla stanu termicznego $\hat{\rho}_T$ układu $N_{\uparrow} = 3, N_{\downarrow} = 1$ cząstek w granicy silnego oddziaływania $g = 10$ dla różnych temperatur T . W układach o równych masach $\mu = 1$ separacja faz wywołana nierówną liczbą cząstek jest natychmiast niszczone w niezerowej temperaturze. W przypadku separacji przestrzennej wywołanej różnicą mas, jednocząstkowy profil gęstości lekkich cząstek nie zmienia się znacząco wraz z parametrem temperatury T . Położenia i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ oraz $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.

widoczną różnicą jest wygładzenie gęstości w cięższym składniku. Powyższy wynik wskazuje, że mechanizm indukowania separacji przez różnicę mas ma całkowicie różne pochodzenie od mechanizmu występującego dla analogicznego układu fermionów o tej samej masie.

Konstrukcja termicznego stanu mieszanego wymagała użycia wyższych stanów wzbudzonych z odpowiednimi wagami. Aby rzucić więcej światła na zjawisko termicznej stabilności przyjrzyjmy się strukturze stanów wzbudzonych. Wyniki opisane w poprzedniej sekcji implikują, że wszystkie stany wielociałowe są istotnie zmienione na skutek zmiany masy jednego ze składników fermionowych. Na rysunku 4.4 przedstawiamy gęstość jednociąłową zarówno wielociałowego stanu podstawowego jak i pięciu kolejnych stanów wzbudzonych. Profile gęstości stanów wzbudzonych charakteryzują się złożoną strukturą, bez większych prawidłowości jeżeli chodzi o występowanie separacji. Jest zatem naturalne, że stan termiczny traci strukturę stanu podstawowego, w której fermiony o większej liczebności będą się dzielić na dwie części. Przy okazji omawiania gęstości jednociąłowych stanów wzbudzonych warto zwrócić uwagę na stan $|\psi_3\rangle$ (pierwszy rząd, środkowa kolumna na rysunku 4.4), który odpowiada całkowicie antysymetrycznemu stanowi Girardeau. Stan Girardeau ma tę samą postać w bazie Focka niezależnie od oddziaływania g : $|\psi_3\rangle = \frac{1}{2}(|321;0\rangle - |320;1\rangle + |310;2\rangle - |210;3\rangle)$. Profil gęstości ma ten sam kształt dla obu rodzajów fermionów, a amplituda gęstości jest proporcjonalna do liczby cząstek w danym składniku. Oddziaływanie kontaktowe nie daje wkładu do energii dzięki antysymetrii



Rysunek 4.4: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\uparrow}(x)$ (gruba niebieska linia) oraz $\rho_{\downarrow}(x)$ (cienka czerwona linia) wyznaczona dla kolejnych stanów wielociałowych $|\psi_i\rangle$ układu w granicy silnego oddziaływania $g = 10$ dla $N_{\uparrow} = 3, N_{\downarrow} = 1$ oraz równych mas $\mu = 1$. Położenia i i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ oraz $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.



Rysunek 4.5: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\uparrow}(x)$ (gruba niebieska linia, ciężkie fermiony) oraz $\rho_{\downarrow}(x)$ (cienka czerwona linia, lekkie fermiony) wyznaczona dla kolejnych stanów wielociałowych $|\psi_i\rangle$ układu w granicy silnego oddziaływania $g = 10$ dla $N_{\uparrow} = 3, N_{\downarrow} = 1$ oraz różnych mas $\mu = 40/6$. Położenia i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ oraz $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.

funkcji falowej, której to antysymetrii nie widać bezpośrednio w gęstości jednocząsteczkowej.

Zupełnie inaczej wygląda sytuacja w przypadku modelu układu potasu i litu ($\mu = 40/6$) przedstawiona na rysunku 4.5. Cechą wspólną kolejnych stanów zbudzonych jest to, że charakteryzują się tym specyficznym rozkładem przestrzennym, co stan podstawowy: ciężkie atomy zajmują miejsce w środku pułapki, podczas gdy lekkie rozdzielają się na dwie części. Taka postać stanów wzbudzonych sprawia, że stan mieszany z nich skonstruowany musi także się charakteryzować własnością separacji lżejszego składnika.

4.3 Jednowymiarowa studnia prostokątna

Separacja w układzie odpychających się fermionów wydaje się być zaskakującym zjawiskiem. Ważnym pytaniem, które należy sobie postawić jest: jak ważne w tym zjawisku jest występowanie zewnętrznego potencjału harmonicznego? Częściowo odpowiedź na pytanie została udzielona w pracy [68], gdzie separacja indukowana różnicą mas była przewidziana dla dwuskładnikowej mieszanki fermionów w przypadku braku zewnętrznego potencjału.

W tej sekcji przyjrzymy się dokładniej podobnym warunkom i zaprezentujemy wyniki uzyskane dla jednowymiarowej studni prostokątnej, czyli dla potencjału wyrażonego wzorem:

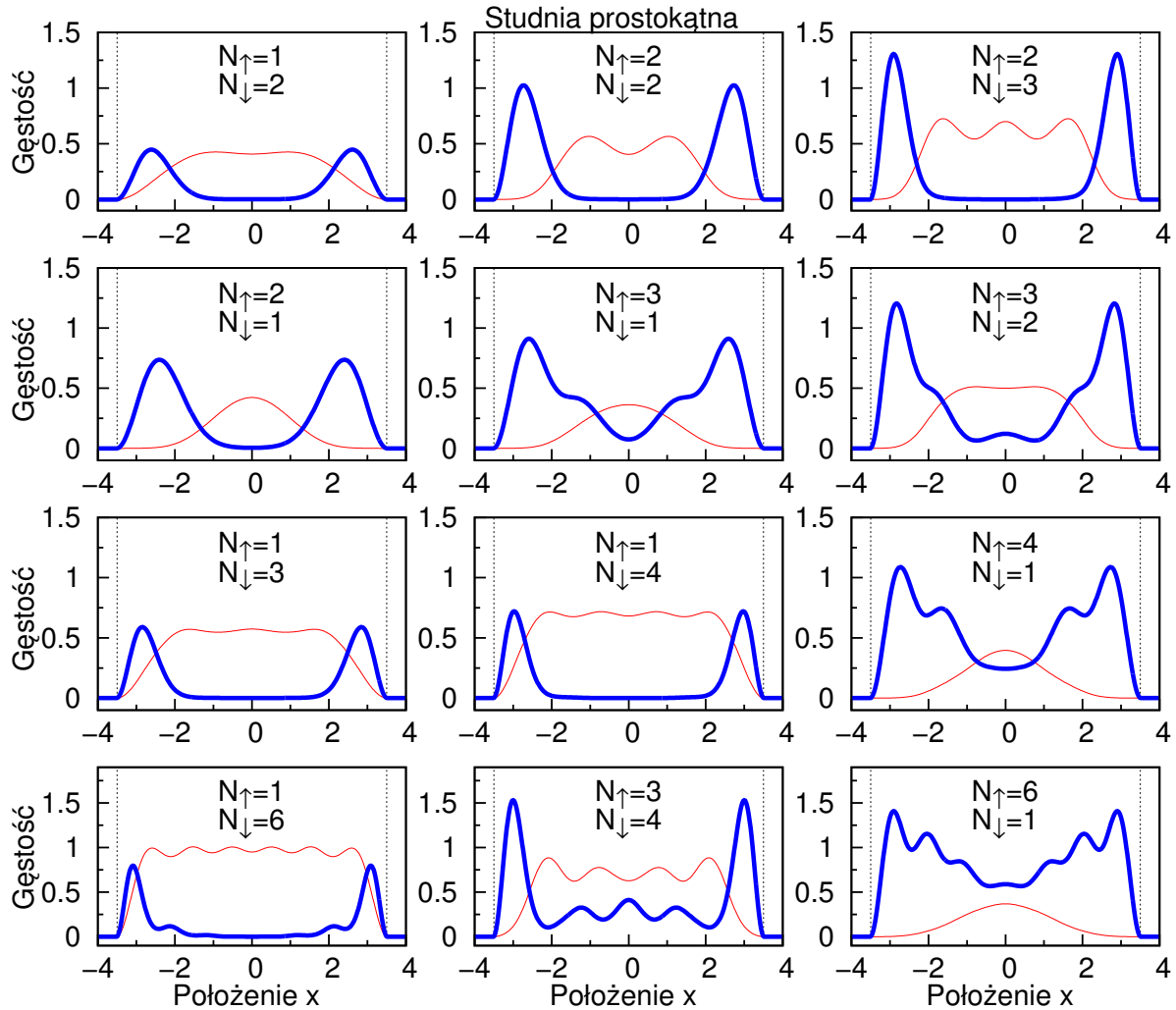
$$V_{\text{Box}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{jeżeli } |x| < L \\ \infty & \text{jeżeli } |x| > L, \end{cases} \quad (4.4)$$

gdzie $2L$ jest szerokością studni. Rozwiązania jednociłowe tego zagadnienia znamy z Rozdziału 1. Mając rozwiązania jednociłowe możemy przeprowadzić pełną analizę analogicznie do zagadnienia fermionów w potencjale oscylatora harmonicznego.

Na rysunku 4.6 przedstawione są profile gęstości jednocząstkowej dla silnie oddziałującego układu dwóch typów cząstek o stosunku mas równym $\mu = 40/6$. Symulacje numeryczne wskazują, że separacja zawsze ma miejsce dla różnych konfiguracji cząstek dla $N_{\uparrow} + N_{\downarrow} \leq 7$. W przypadku jednorodnego potencjału separacja gęstości także jest obecna w układzie. Co ciekawe, w przypadku studni kwantowej, to ciężkie cząstki zostają rozdzielone, a lekkie pozostają w środku.

Także w przypadku studni prostokątnej separację profilu gęstości cięższych cząstek można wytłumaczyć za pomocą argumentu energetycznego. Jednocząstkowe funkcje falowe są dokładnie takie same dla obu składników i nie zależą od stosunku mas μ . Z tego faktu wynika, że oddziaływanie kontaktowe nie faworyzuje energetycznie żadnego typu cząstek, ponieważ wielkość U_{ijkl} jest symetryczna ze względu na zamianę fermionu \uparrow z fermionem \downarrow . Jedyna różnica w energiach stanów wielociłowych pochodzi od jednocząstkowej części hamiltonianu (2.2). Koszt energii potrzebny do wzbudzenia cięższej cząstki jest μ razy mniejszy (zobacz równanie (2.14)), stąd separacja w tym składniku jest faworyzowana.

Dla wartości stosunku mas μ bliskich jedności, potrzebne jest znacznie silniejsze oddziaływanie, aby spowodować separację w profilach gęstości. Ta obserwacja jest zgodna z intuicyjnym obrazem, tzn. dla prawie równych mas żaden ze składników nie jest wystarczająco faworyzowany, więc dużo silniejsze oddziaływania jest potrzebne, aby wystarczająco złamać symetrię układu i spowodować separację.



Rysunek 4.6: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\uparrow}(x)$ (gruba niebieska linia, cięższe fermiony) oraz $\rho_{\downarrow}(x)$ (cienka czerwona linia, lżejsze cząstki) wyznaczone na stanie podstawowym układu dla różnej liczebności cząstek w silnym oddziaływaniu $g = 4$ dla stosunku mas $\mu = 40/6$. Czarnymi liniami zaznaczone są ściany potencjału. W przeciwieństwie do separacji indukowanej różnicą mas w oscylatorze harmonicznym, w wypadku studni prostokątnej separacja dotyczy zawsze jednocząstkowej gęstości cięższego składnika, a efekt nie zależy to od liczebności fermionów w poszczególnych składnikach. W szczególności, separacja zachodzi także w układzie, w którym jest równa liczba fermionów $N_{\downarrow} = N_{\uparrow}$. Położenie x i gęstość ρ_{σ} są mierzone odpowiednio w jednostkach $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ i $\sqrt{(m_{\downarrow}\omega)/\hbar}$.

Rozdział 5

Przejście indukowane zmianą kształtu pułapki

W poprzednim rozdziale został opisany efekt separacji profili gęstości w układzie ultrazimnych fermionów o różnych masach. Okazało się, że charakter tej separacji jakościowo różni się w zależności od tego czy fermiony są umieszczone w zewnętrznym potencjale harmonicznym czy w potencjale studni prostokątnej. W pierwszym przypadku lekkie cząstki są wypychane na zewnątrz, a ciężkie pozostają w środku. Natomiast w drugim przypadku jest dokładnie odwrotnie: to ciężkie cząstki są wypychane na zewnątrz, a lekkie zostają w środku. W tej sytuacji naturalnym pytaniem jest: jak przebiegałby proces zmiany profilu gęstości w układzie, w którym adiabaticznie zmieniany byłby kształt zewnętrznego potencjału? W tym rozdziale, opartym na pracy [3], znajduje się odpowiedź na powyższe pytanie. Aby tę odpowiedź uzyskać, rozważmy zatem następujący hamiltonian:

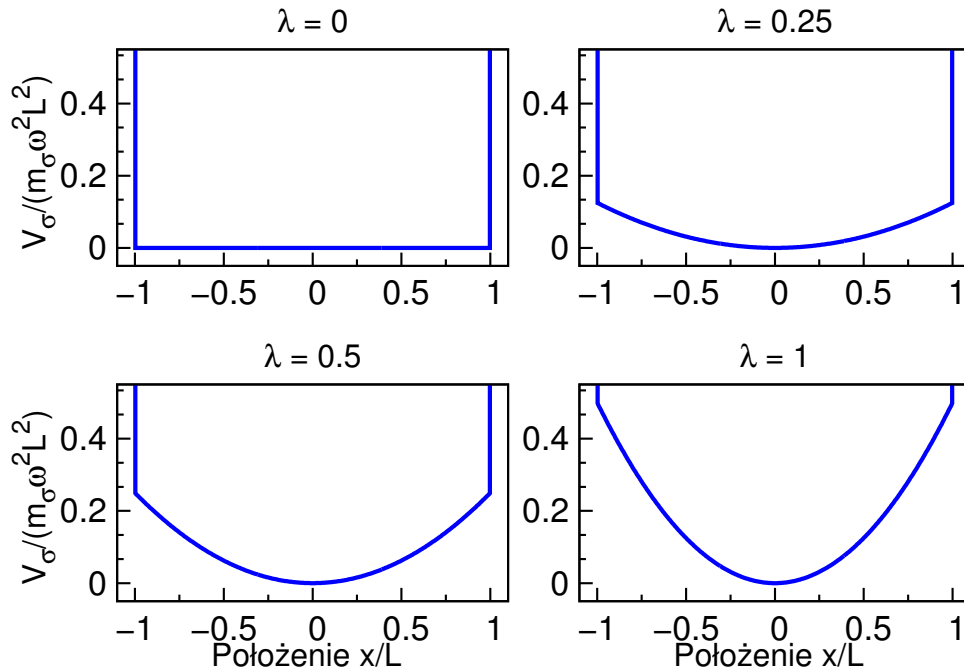
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_1} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V_1(x_i, \lambda) \right] + \sum_{j=1}^{N_1} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial y_j^2} + V_1(y_j, \lambda) \right] + g_{1D} \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_1} \delta(x_i - y_j), \quad (5.1)$$

gdzie $V_\sigma(x, \lambda)$ jest zewnętrznym potencjałem, w którym umieszczone są fermiony typu σ . Potencjał $V_\sigma(x, \lambda)$ definiujemy następująco:

$$V_\sigma(x, \lambda) = \begin{cases} \frac{1}{2} \lambda m_\sigma \omega^2 x^2 & \text{jeżeli } |x| < L \\ \infty & \text{jeżeli } |x| > L, \end{cases} \quad (5.2)$$

gdzie λ jest bezwymiarowym parametrem kształtu, który opisuje geometrię pułapki. Na rysunku 5.1 pokazano jak zależy kształt zewnętrznego potencjału od parametru λ w naturalnych jednostkach energii dla danego typu fermionu $m_\sigma \omega^2 L^2$. Zwiększanie parametru λ powoduje, że pułapka coraz bardziej przypomina oscylator harmoniczny. W granicy $\lambda \rightarrow 0$ odtwarzany jest potencjał studni prostokątnej (2.11), a z kolei w granicy $\lambda \rightarrow 1$ „obcięty” oscylator harmoniczny

(tzn. potencjał oscylatora harmonicznego ograniczonego twardymi ścianami). Oczywiście w tym drugim przypadku istnienie twardych ścian powoduje, że stany jednocząstkowe (zwłaszcza te wysoko wzbudzone) różnią się od stanów zwykłego oscylatora. W szczególności stany wysoko wzbudzone zaczynają przypominać stany studni kwantowej. Jednak niskie stany wzbudzone oscylatora harmonicznego oraz obciążonego oscylatora harmonicznego $V_\sigma(x, 1)$ nie różnią się od siebie znacząco, o ile ściany potencjału będą położone odpowiednio daleko od siebie. Argumentem na traktowanie $V_\sigma(x, 1)$ jak potencjału harmonicznego jest także to, że funkcje falowe oscylatora harmonicznego daleko od środka pułapki zanikają jak e^{-x^2} i nie wnikają do regionów związanych z twardymi ścianami [96]. Warto zauważyć, że podobny potencjał został przy-



Rysunek 5.1: Kształt potencjału $V_\sigma(x, \lambda)$ w jednostkach naturalnych dla danego typu cząstek dla różnych wartości parametru λ . Dla $\lambda = 0$ dostajemy kształt jednowymiarowej studni. Zwiększając ten parametr pułapka coraz bardziej przypomina oscylator harmoniczny.

gotowany doświadczalnie w grupie Zorana Hadzibabica [43]. W tym celu atomy umieszczają się w pułapce harmonicznego, następnie dodaje się dodatkowe „ściany” efektywnego potencjału. Na końcu wyłącza się powoli pułapkę harmoniczną. Sytuacja ta odpowiadałaby wytworzeniu potencjału $V_\sigma(x, 1)$, a następnie zmniejszaniu wartości parametru λ do zera. Z uwagi na kontekst doświadczalny, potencjał (5.2) wydaje się mieć bardzo naturalną konstrukcję.

Dla danego kształtu pułapki λ , można numerycznie wyznaczyć jednocząstkowe stany $\phi_{n\sigma}^{(\lambda)}(x)$ i odpowiadające im energie własne $E_{n\sigma}^{(\lambda)}$ używając metody ścisłej diagonalizacji jednocząstkowego hamiltonianu

$$H_\sigma^{(\lambda)} = -\frac{\hbar^2}{2m_\sigma} \frac{d^2}{dx^2} + V_\sigma(x, \lambda). \quad (5.3)$$

Diagonalizacja jest wykonana, tak jak było to omówione w Rozdziale 3, w dziedzinie położenia na gęstej siatce z odległością δx . Otrzymane w ten sposób stany $\phi_{n\sigma}^{(\lambda)}(x)$ służą jako baza jednociągła do dalszej analizy.

W granicznym przypadku oscylatora harmonicznego ($\lambda \rightarrow 1$), niskowzbudzone, jednociągłe funkcje własne obu typów fermionów są związane ze sobą za pomocą następującego skalowania:

$$\phi_{n\uparrow}^{(1)}(x) = (m_{\uparrow}/m_{\downarrow})^{1/4} \phi_{n\downarrow}^{(1)}(\sqrt{m_{\uparrow}/m_{\downarrow}}x).$$

To oznacza, że funkcje falowe cięższych cząstek są bardziej zlokalizowane w środku pułapki. W tym wypadku energie własne nie zależą od masy cząstki i zależą liniowo od głównej liczby kwantowej $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$E_n^{(1)} = \hbar\omega \left(n - \frac{1}{2} \right). \quad (5.4)$$

Dla ujednolicenia zapisu w tym rozdziale, w powyższym wzorze numerujemy stany od $n = 1$, a nie od $n = 0$, tak jak się zwykle spotyka w literaturze w problemie oscylatora harmonicznego. Warto także zauważyć, że dla odpowiednio wysokich wzbudzeń n , poprawki od twardych ścian stają się ważne. Jak wyjaśnialiśmy wcześniej, aby uniknąć tego problemu w naszym numerycznym podejściu, ustalamy szerokość studni prostokątnej na tyle dużą, aby obecność ścian nie wpływała na kształt orbitali jednocząstkowych, które są znacząco obsadzone dla stanu podstawowego. Można sprawdzić, że dla długości L wybranej w tej rozprawie i rozważanym zakresie parametrów, wyniki dla standardowego oscylatora harmonicznego (bez ścian) są odtworzone dla $\lambda = 1$. Dlatego odtąd będziemy traktować $\lambda = 1$ jak prawdziwy oscylator harmoniczny.

W przypadku potencjału studni prostokątnej ($\lambda = 0$), kształty funkcji falowych nie zależą od masy i mają dobrze znaną formę:

$$\phi_{n\sigma}^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin \left[\frac{n\pi(x+L)}{2L} \right]. \quad (5.5)$$

Jednakże, w tym wypadku, jednocząstkowe energie własne zależą od mas i liczby kwantowej $n = 1, 2, 3, \dots$:

$$E_{n\sigma}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{8m_{\sigma} L^2} \propto n^2. \quad (5.6)$$

Wszystkie wielkości wyrażone są w jednostkach oscylatora harmonicznego cząstek o spinie \downarrow , tzn. wszystkie długości są mierzone w jednostkach $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$, energie w $\hbar\omega$, pędy w jednostkach $\sqrt{\hbar m_{\downarrow}\omega}$, etc. Wprowadzamy także bezwymiarowy parametr stosunku mas $\mu = m_{\uparrow}/m_{\downarrow}$. Ów stosunek mas jest dużo większy od jedności dla mieszaniny litu i potasu: $\mu = 40/6$. W tych jednostkach, jednocząstkowe hamiltoniany (5.3) mają formę:

$$H_{\downarrow}^{(\lambda)} = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \lambda x^2, \quad H_{\uparrow}^{(\lambda)} = \frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu}{2} \lambda x^2. \quad (5.7)$$

Aby uczynić dalszą analizę przejrzystą, rozmiar układu jest wybrany w taki sposób, że jednocząstkowe widma skrajnych hamiltonianów (tzn. tych dla potencjału studni oraz potencjału oscylatora harmonicznego) mają przerwę energetyczną pomiędzy najniższymi poziomami tego samego rzędu, tzn. $E_{2\downarrow}^{(0)} - E_{1\downarrow}^{(0)} \approx E_2^{(1)} - E_1^{(1)}$, co odpowiada następującemu warunkowi

$$1 \approx \frac{3\hbar\pi^2}{8m_{\downarrow}\omega L^2}. \quad (5.8)$$

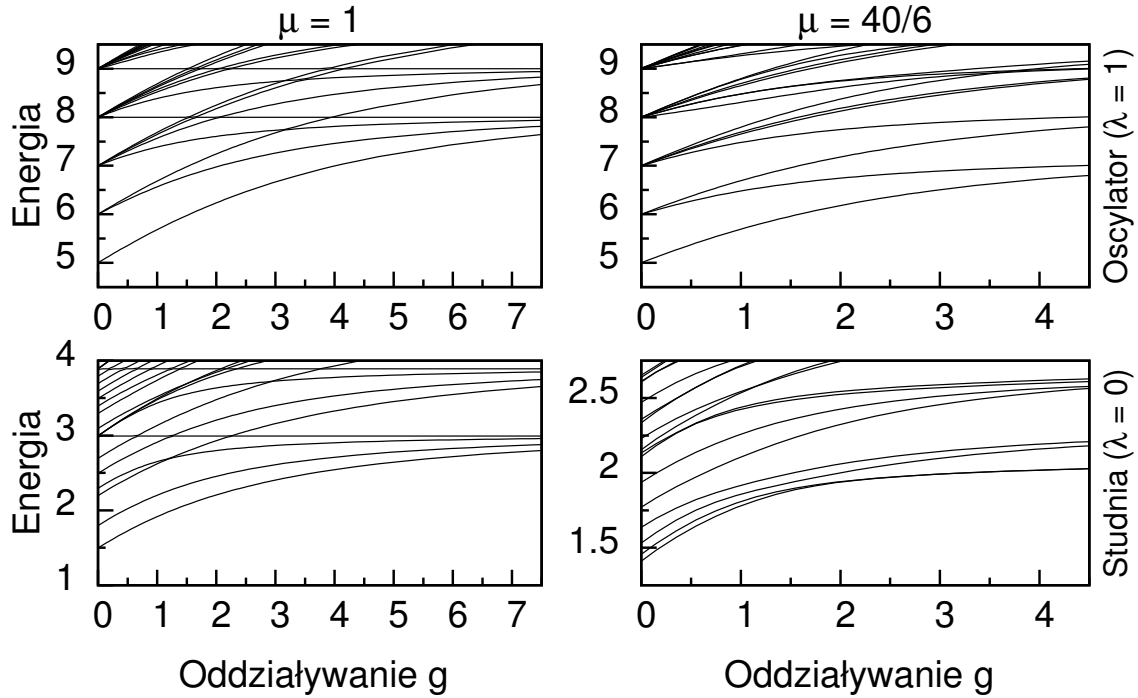
Ten warunek decyduje o odpowiednim rozmiarze układu $2L \approx 3.9\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$. Aby się upewnić, że ściany nie naruszają w sposób zauważalny jednocząstkowych gęstości w przypadku obciążonego oscylatora harmonicznego, ustalamy rozmiar pudełka na nieco większy, tzn. $2L = 7\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$. Ten warunek powoduje, że przerwy energetyczne między najniższymi poziomami mają ten sam rząd wielkości.

5.1 Widmo wielociałowe

Na początek zostanie zbadane jak na własności spektralne wielociałowego hamiltonianu wpływa kształt zewnętrznego potencjału λ oraz stosunek mas μ . Wyniki dla potencjału harmonicznego (górny rząd na rysunku 5.2) były szczegółowo opisane w Rozdziale 3. Wynika z nich, że wraz ze zwiększaniem parametru stosunku mas μ quasi-degeneracja widma wielociałowego zostaje częściowo zniesiona w granicy silnego oddziaływania (patrzy prawy górny panel na rys. 5.2). Jest to spowodowane zniesieniem globalnych symetrii hamiltonianu, które są obecne gdy masy dwóch typów cząstek są takie same — jest to symetria zamiany jednego rodzaju cząstek na drugie.

Okazuje się, że widmo hamiltonianu mieszaniny fermionów umieszczonych w studni prostokątnej (dolny rząd na rysunku 5.2) wykazuje pewne podobieństwa do widma hamiltonianu układu fermionów uwięzionych w pułapce harmonicznego. Do tych podobieństw należy quasi-degeneracja poziomów energetycznych dla silnych oddziaływań oraz istnienie stanów Girardeau (widocznych jako poziome linie w lewej kolumnie rysunku 5.2) W tym miejscu warto także zauważyć, że dla układu o równych masach oraz dowolnego parametru $0 < \lambda < 1$ także istnieją stany Girardeau. Jest to bezpośrednia konsekwencja tego, że konstrukcja całkowicie antysymetrycznego stanu może być zastosowana dla dowolnego λ , ale tylko w układzie o równych masach, gdy orbitale jednocząstkowe są takie same dla obu typów fermionów.

Także w przypadku studni prostokątnej (podobnie jak dla oscylatora harmonicznego) wielociałowe widmo hamiltonianu (5.1) się zmienia, gdy fermiony mają różne masy (dolny prawy wykres na rysunku 5.2). Zmiana ta zachodzi z powodu zależności energii jednociałowej cząstek (5.6) od stosunku mas μ i jest widoczna nawet w przypadku braku oddziaływania $g = 0$.

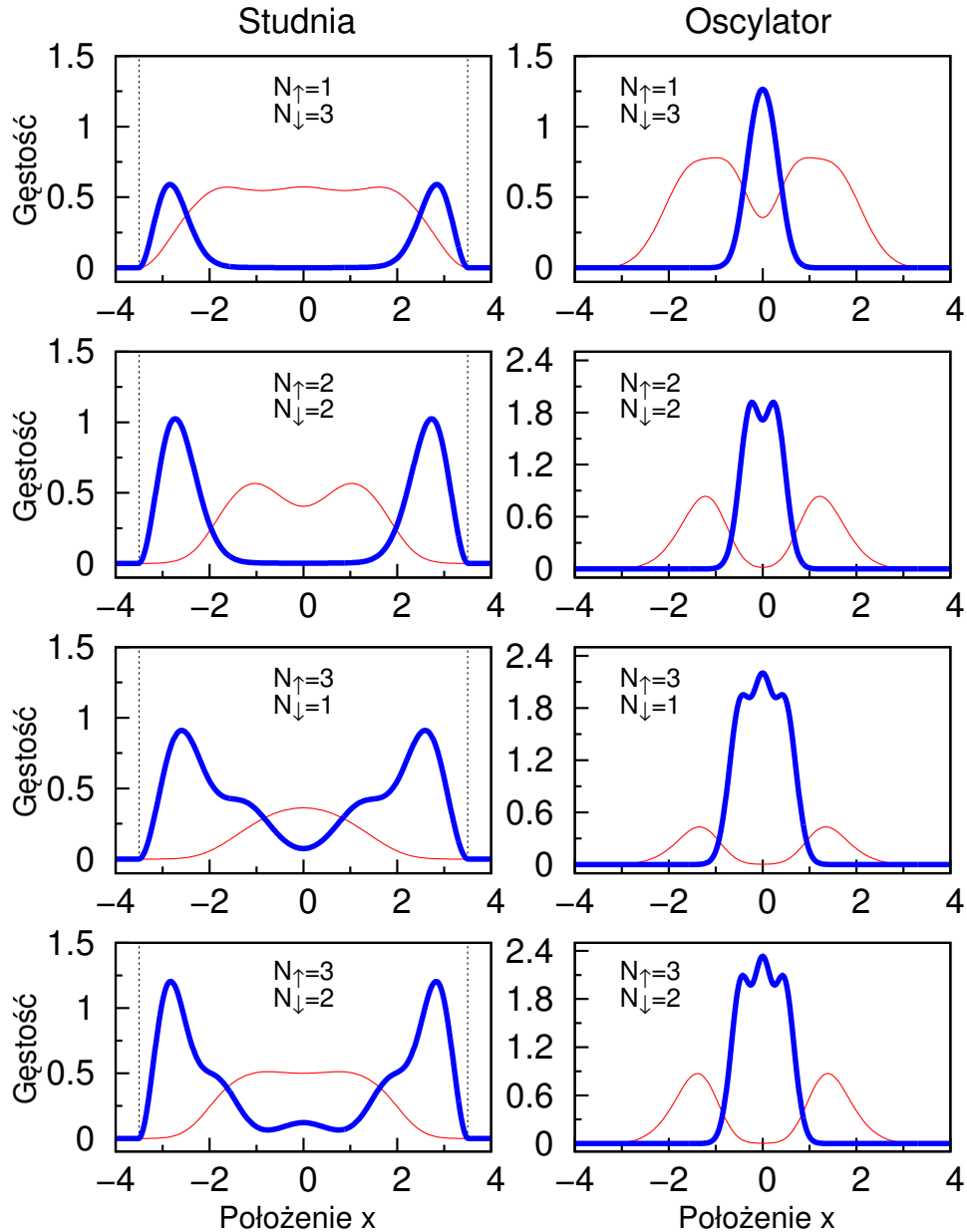


Rysunek 5.2: Widma układów składających się z $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 1$ fermionów w funkcji oddziaływania g . Górny rząd ukazuje wyniki dla potencjału oscylatora harmonicznego, a dolny rząd dla potencjału studni prostokątnej. Quasi-zdegenerowane pasma energetyczne widoczne w lewej kolumnie są rozszczepione, gdy masy różnych rodzajów fermionów są różne $\mu \neq 1$ (prawa kolumna). Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_{\downarrow}}$.

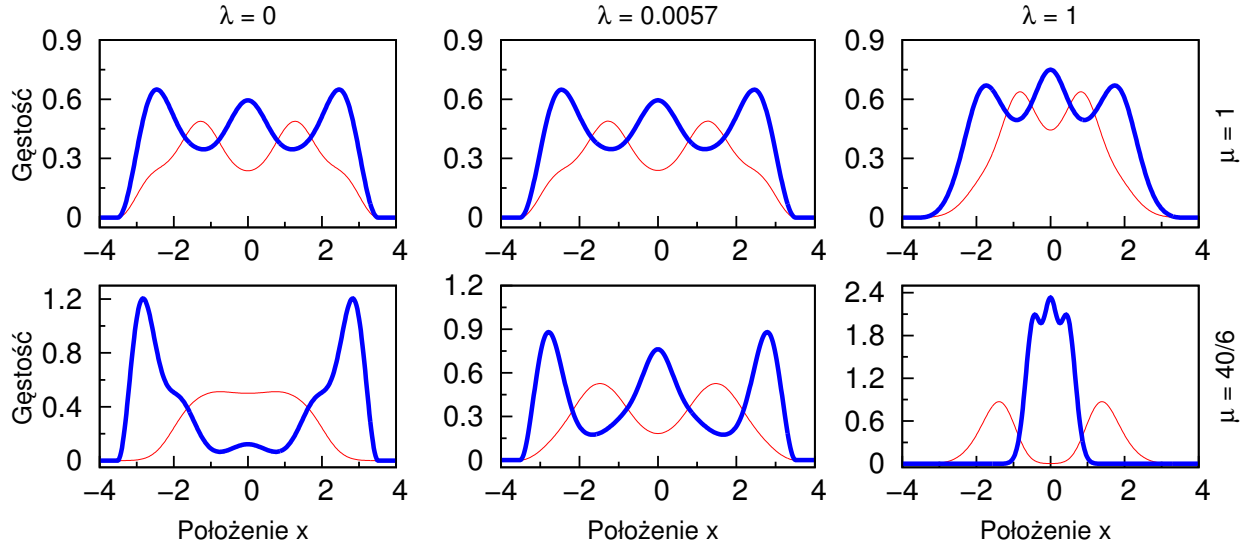
5.2 Porównanie z układem o tej samej masie

W poprzednim rozdziale zostało pokazane, że separacja profili gęstości przebiega inaczej w różnych potencjałach zewnętrznych. Na rysunku 5.3 porównano separację profilu gęstości w dwóch skrajnych kształtach potencjału tzn. w przypadku studni (lewa kolumna) oraz w przypadku oscylatora harmonicznego (prawa kolumna). Odpowiadające sobie wykresy są sporządzone dla tej samej liczby cząstek w obu składnikach i tej samej wartości oddziaływania. Na podstawie tego porównania można przypuszczać, że mechanizm separacji indukowanej różnicą mas ma inny charakter w tych dwóch przypadkach.

Na rys. 5.4 rozbudowany został przykład $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 2$ cząstek (dolne panele na rys. 5.3) o równe masy oraz o kształt zewnętrznego potencjału dla $0 \neq \lambda \neq 1$. Jak wiadomo, w przypadku równych mas ($\mu = 1$) separacja może być wywołana tylko przez różnicę liczby cząstek w obu typach $N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$. W konsekwencji zawsze, kiedy $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$, oba składniki mają ten sam profil gęstości jednocząstkowej i separacja nie może być zaobserwowana. Sytuacja się zmienia, gdy układ różni się choć trochę liczbami cząstek. Jako przykład posłuży nam układ $N_{\uparrow} = 3$ i $N_{\downarrow} = 2$ cząstek.



Rysunek 5.3: Porównanie różnych scenariuszy separacji dla układów fermionów o różnych masach ($\mu = 40/6$) indukowanych przez różne kształty pułapki, w granicy silnego oddziaływania $g = 4$. Lewa kolumna odpowiada potencjałowi studni prostokątnej, natomiast prawa oscylatorowi harmonicznemu. Gruba niebieska i cienka czerwona linia przedstawiają jednocząstkowe profile gęstości dla odpowiednio ciężkiego i lekkiego składnika. Kolejne rzędy odpowiadają różnym konfiguracjom liczby cząstek N_{\downarrow} oraz N_{\uparrow} . Niezależnie od liczby cząstek danego typu, separacja jest zawsze obecna albo w składniku cięższym (studnia) albo lżejszym (oscylator harmoniczny). Położenia i gęstości są mierzone w jednostkach odpowiednio $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ oraz $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.



Rysunek 5.4: Jednocząstkowa gęstość $\rho_{\downarrow}(x)$ (gruba niebieska linia, cięższy składnik) oraz $\rho_{\uparrow}(x)$ (cienka czerwona linia, lżejszy składnik) wyznaczona dla stanu podstawowego układu złożonego z $N_{\downarrow} = 3$ i $N_{\uparrow} = 2$ cząstek w granicy silnego oddziaływania $g = 4$. Położenia i gęstości są mierzone w jednostkach, odpowiednio, $\sqrt{\hbar/(m_{\downarrow}\omega)}$ i $\sqrt{m_{\downarrow}\omega/\hbar}$.

Charakterystyczne oscylacje widziane na górnych panelach rys. 5.4 pojawiają się w profilach gęstości stanu podstawowego w granicy silnego oddziaływania, a oba składniki wykazują antyferromagnetyczny porządek. Wydaje się, że ten porządek nie zależy od kształtu zewnętrznego potencjału. To uogólnia wyniki otrzymane niedawno dla oscylatora harmonicznego badanego w skończonej wartości oddziaływania g [69] i rozszerza wyniki otrzymane dla nieskończonych oddziaływań [94, 97].

W zestawieniu wyników dla $\mu = 1$ oraz $\mu = 40/6$ (odpowiednio górny oraz dolny rząd na rys. 5.4) można zaobserwować znaczące jakościowe różnice. Jak wiadomo, w pułapce harmoniczej cięższe cząstki koncentrują się w środku pułapki, a lżejsze są wypychane na zewnątrz. W studni prostokątnej to cięższe cząstki są wypychane w pobliże ścian pułapki, a lekkie fermiony znajdują się w środku. Środkowy dolny wykres ukazuje profil gęstości dla pośredniego kształtu potencjału. Należy jednak pamiętać, że wyniki są otrzymane dla dużego, ale skończonego oddziaływania. Numeryczne obliczenia, wykonane dla wielu różnych konfiguracji liczby cząstek i kształtów pułapki, pokazują, że dla dowolnego kształtu opisanego parametrem z przedziału $0 \leq \lambda \leq 1$ istnieje pewna krytyczna wartość oddziaływania, powyżej której jedna z dwóch typów separacji pojawia się w układzie. Można przypuszczać, że dla nieskończonego oddziaływania każdy układ kilku fermionów o różnej masie będzie wykazywał separację w jednociałowej gęstości. Od kształtu zewnętrznego potencjału zależy jedynie to, w którym składniku dochodzi do separacji. To oznacza, że układ doświadcza pewnego rodzaju przejścia pomiędzy różnymi rodzajami uporządkowania w granicy nieskończonego oddziaływania, które jest powodowane

adiabaticzną zmianą kształtu potencjału. Jak się okazuje, własności tego przejścia mogą być zrozumiane za pomocą metod dobrze znanych z teorii kwantowych przejść fazowych.

5.3 Przejście powodowane zmianą kształtu pułapki

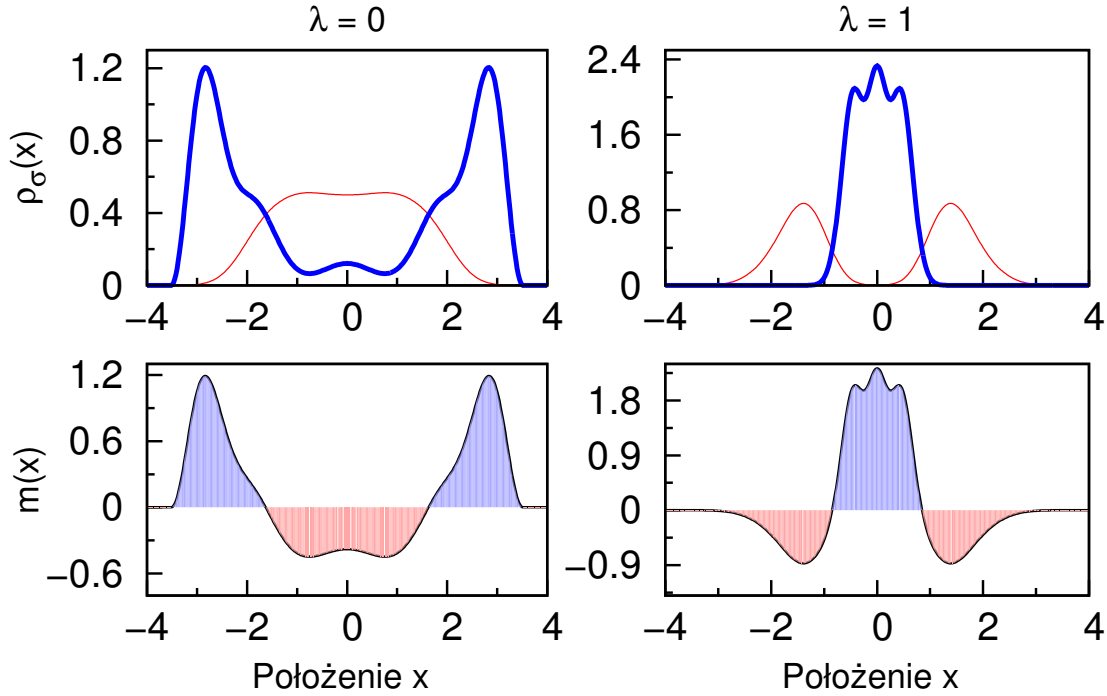
W dwóch skrajnych kształtach pułapki $V_\sigma(x, \lambda)$ separacja profilu gęstości powodowana różnicą mas jest przeciwnego typu. W zależności od kształtu zewnętrznego potencjału, cięższe lub lżejsze cząstki są wypychane na zewnątrz dla odpowiednio silnego odpychania między cząstkami. W ramach modelu opisanego hamiltonianem (5.1) możemy badać przejście między tymi dwoma porządkami, które zachodzi przy adiabaticznej zmianie kształtu pułapki. Aby nasza analiza była nie tylko jakościowa, ale także ilościowa powinniśmy wprowadzić pewną wielkość, która jest związana z porządkiem, a jej wartość będzie wskazywać na rodzaj separacji obecnej w układzie. Wybór parametru porządku cechuje pewna dowolność, jednak wydaje się dosyć naturalne, aby skupić się na następującej wielkości:

$$m(x) = \rho_\uparrow(x) - \rho_\downarrow(x), \quad (5.9)$$

którą można interpretować jako przestrzenną gęstość rozkładu magnetyzacji. Rozkład (5.9) różni się w zależności od tego czy lekkie czy ciężkie cząstki są wypchnięte ze środka pułapki, co jest zilustrowane na rysunku 5.5. Jest to powodowane faktem, że funkcja $m(x)$ jest antysymetryczna ze względu na zamianę typów cząstek \downarrow i \uparrow . Zamiast rozpatrywać pełny rozkład magnetyzacji $m(x)$ wygodne jest jednak wprowadzenie uproszczonej wielkości, której wartość od razu będzie informowała nas o typie uporządkowania występującego w układzie (wielkość pełniącą funkcję parametru porządku). Aby znaleźć taką wielkość, rozpatrzmy kolejne momenty rozkładu $m(x)$. Zerowy moment, czyli norma magnetyzacji $\int_{-L}^L dx m(x) = N_\uparrow - N_\downarrow$, jest wielkością całkowicie niezależną od kształtu pułapki i stanu kwantowego. Nie jest zatem dobrym kandydatem na parametr porządku. Ze względu na symetrię odbić przestrzennych względem środka układu, pierwszy moment magnetyzacji $m(x)$ znika i także nie może prawidłowo rozróżniać typu porządku. Dopiero drugi moment magnetyzacji $m(x)$ będzie odróżniał separację ciężkich oraz lekkich cząstek:

$$\sigma = \int_{-L}^L dx x^2 m(x). \quad (5.10)$$

Na rysunku 5.6 pokazujemy zależność parametru porządku σ od parametru kształtu pułapki λ dla różnej liczby cząstek oraz różnej wartości oddziaływania g . Dla dwóch skrajnych typów pułapki widzimy, że wielkość σ wysyca się do dwóch różnych od siebie wartości odpowiadającym różnym uporządkowaniom. To oznacza, że wielkość σ gra rolę parametru porządku i może zostać użyta jako wskaźnik danego typu uporządkowania. Tak długo jak dany rodzaj separacji jest obecny w układzie, wartość parametru σ jest niemal stała. Jak widać na rys. 5.6 istnieje

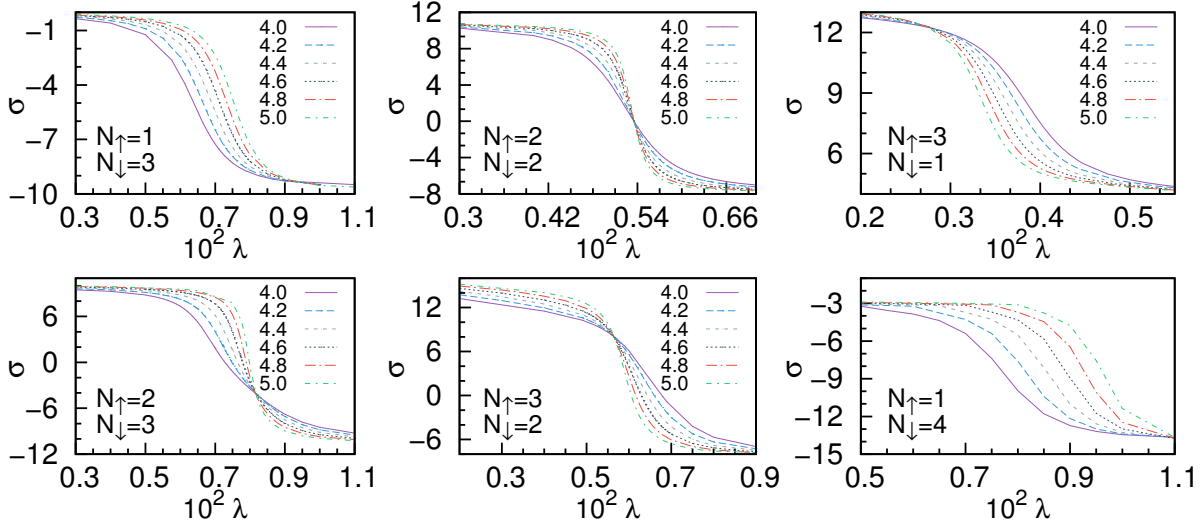


Rysunek 5.5: Gęstość magnetyzacji $m(x)$ wyznaczona z profili gęstości jednociąłowych $\rho_\sigma(x)$ dla stanu podstawowego układu złożonego z $N_\uparrow = 3$ i $N_\downarrow = 2$ cząstek w granicy silnego oddziaływania $g = 4$. Położenia są mierzone w jednostkach $\sqrt{\hbar/(m_\uparrow\omega)}$, a gęstość magnetyzacji oraz jednociąłowa w $\sqrt{m_\uparrow\omega/\hbar}$.

jednak taki kształt pułapki, że wartość parametru σ gwałtownie się zmienia. Co więcej, dla silnych oddziaływań, przejście jest bardziej gwałtowne. Można się spodziewać, że dla nieskończonego odpychania otrzymamy charakterystyczną funkcję schodkową. Wszystko powyższe oznacza, że przejście między porządkami ma wiele własności przemiany fazowej [98, 99] i może być przeanalizowana za pomocą metod znanych z teorii kwantowych przejść fazowych [100, 101]. W naszym układzie rolę parametru porządku oraz parametru kontroli grają odpowiednio: drugi moment gęstości magnetyzacji σ oraz parametru kształtu pułapki λ . Z tego punktu widzenia granica termodynamiczna w rozważanym układzie odpowiada nieskończonemu oddziaływaniu między cząstkami $g \rightarrow \infty$.

Aby scharakteryzować przejście między różnymi porządkami należy przeanalizować nie tylko parametr porządku, ale także jego wyższe pochodne. Naturalnie, najważniejsza jest pochodna najniższego rzędu, która jest rozbieżna w punkcie przejścia. Nasze numeryczne wyniki wskazują, że w badanym przypadku, to pierwsza pochodna σ ma tę cechę w granicy nieskończonego oddziaływania. W analogii do fizyki przejść fazowych ta wielkość ma wszystkie cechy podatności, ponieważ mierzy zmiany gęstości magnetyzacji $m(x)$ przy małych zmianach parametru kontroli λ :

$$\chi(\lambda) = \frac{d\sigma(\lambda)}{d\lambda}. \quad (5.11)$$

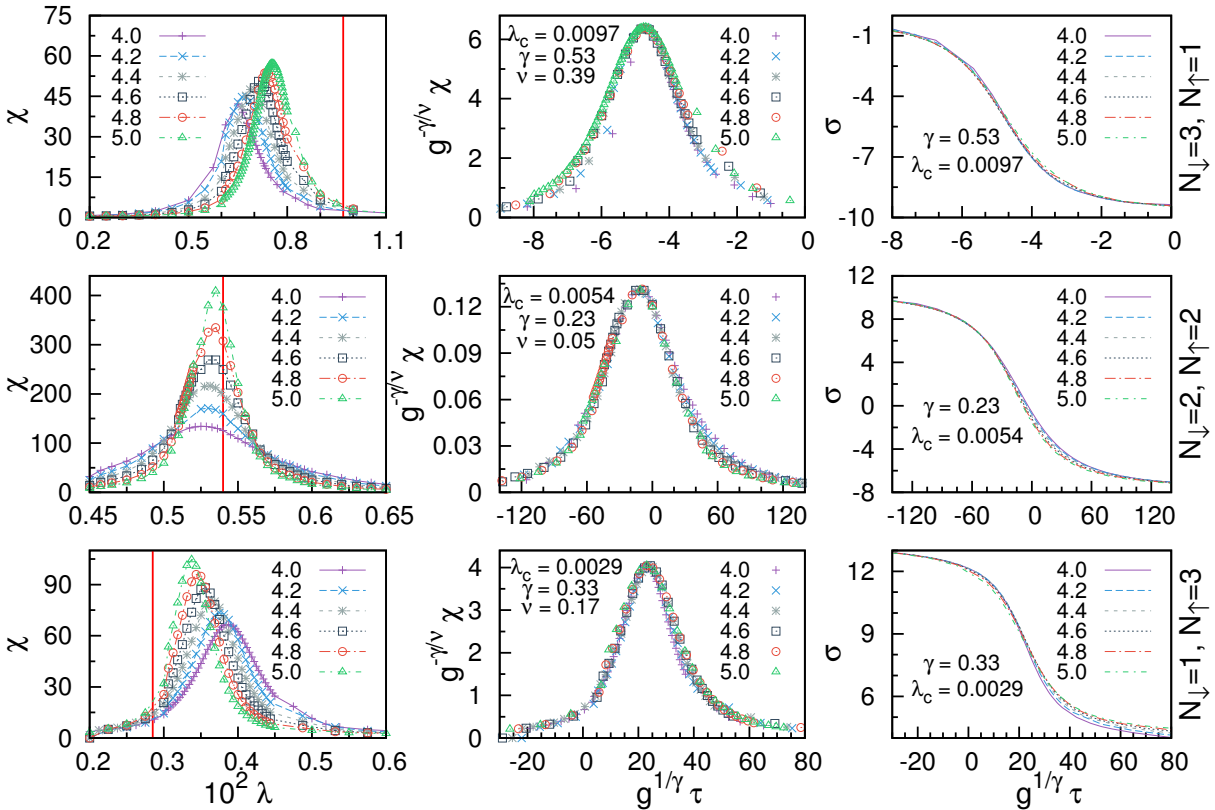


Rysunek 5.6: Drugi moment magnetyzacji σ (5.10) w funkcji kształtu pułapki dla różnych wartości oddziaływania (od $g = 4$ do $g = 5$). Każdy wykres odpowiada określonej liczbie cząstek danego typu. Należy zwrócić uwagę, że dla skrajnych kształtów pułapki, wartość funkcji σ wysyca się do pewnego określonej wartości, podczas gdy σ zmienia się monotonicznie w pobliżu punktu przejścia między porządkami. Drugi moment σ jest wyrażony w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar/(m_{\downarrow}\omega)$.

Numerycznie wyznaczamy podatność χ dla różnej liczby cząstek oraz różnej wartości oddziaływania g (przykłady dla całkowitej liczby cząstek $N_{\downarrow} + N_{\uparrow} = 4$ są pokazane w lewej kolumnie rysunku 5.7). Postać funkcji $\chi(\lambda, g)$ zależy zarówno od kształtu (parametr kontroli λ) jak i oddziaływania g . Jej maksimum rośnie wraz z wartością oddziaływania oraz nieznacznie zmienia swoje położenie. Można przypuszczać, że dla nieskończenie dużych oddziaływań kontaktowych podatność χ będzie rozbieżna w punkcie przejścia między dwoma rodzajami separacji. To zachowanie jest bezpośrednim skutkiem wyostrowania się funkcji σ dla silnych oddziaływań (zobacz rysunek 5.6).

Analogia z teorią kwantowych przejść fazowych jest jeszcze bardziej widoczna, gdy zbadamy własności skalowania funkcji χ dla silnych oddziaływań w pobliżu przejścia krytycznego. W tym celu założymy, że parametr porządku σ wykazuje pewne naturalne skalowanie w pobliżu punktu przejścia λ_c , tzn. jest jednorodną funkcją jego istotnych parametrów: siły oddziaływania g oraz unormowanego kształtu pułapki zdefiniowanego jako $\tau = (\lambda - \lambda_c)/\lambda_c$. W konsekwencji, te same cechy będą wykazywać wszystkie pochodne parametru porządku σ . W szczególności dla podatności oznacza to, że istnieje pewna uniwersalna funkcja $\tilde{\chi}(\xi)$, która decyduje o kształcie podatności $\chi(\lambda, g)$ dla różnych kształtów pułapki oraz różnych wartości oddziaływania. Na podobieństwo do teorii kwantowych przejść fazowych, założymy następujący *ansatz skalowania* [98, 99]:

$$\chi(\tau, g) = g^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(g^{1/\nu} \tau), \quad (5.12)$$



Rysunek 5.7: Własności skalowania układu kilku ciał. Lewe panele: podatność $\chi(\tau, g)$ w funkcji kształtu pułapki λ dla różnych wartości oddziaływania g oraz różnej liczby cząstek N_l, N_l . Charakterystyczne maksimum podatności, którego wysokość wzrasta wraz z oddziaływaniem g , jest dobrze widoczny. Pionowa czerwona linia odpowiada krytycznej wartości kształtu pułapki λ_c otrzymanej przez ekstrapolację wyników do nieskończonego odpychania. Środkowe panele: przeskalowana podatność w funkcji unormowanego oraz przeskalowanego parametru kształtu pułapki. Prawe panele: drugi moment σ dla takiej samej procedury skalowania dla kształtu pułapki. Podatność χ jest wyrażona w jednostkach $\hbar/(m_l \omega)$.

gdzie ν i γ są odpowiednimi wykładnikami krytycznymi modelu. Jeżeli założenie o własnościach skalowania jest poprawne, wtedy istnieje odpowiedni wybór wykładników krytycznych, dla którego występuje tzw. kolaps wszystkich punktów należących do krzywych $\chi(\tau, g)$ do jednej uniwersalnej krzywej $\tilde{\chi}(\xi)$. Aby wykazać, że nasz układ w rzeczy samej posiada tę własność, wykonaliśmy odpowiednie numeryczne obliczenia oparte na *metodzie kolapsu danych*. Stosując tę metodę można znaleźć wielkość γ/ν wykreślając logarytm maksimum funkcji $\ln \chi$ dla różnych wartości oddziaływań w funkcji $\ln g$. Następnie, przekształcając ansatz (5.12) do postaci

$$\tilde{\chi}(\tau) = g^{-\gamma/\nu} \chi(g^{-1/\nu} \tau, g), \quad (5.13)$$

należy tak dobrać parametry γ , ν oraz λ_c , aby krzywe dla różnej wartości oddziaływania g się na siebie nałożyły. Więcej szczegółów można znaleźć w artykułach [98, 99, 101]. Wyniki uzyskane dzięki tej metodzie są przedstawione w środkowej kolumnie rysunku 5.7.

Jest wyraźnie widoczne, że po odpowiednim przeskalowaniu funkcji χ oraz oddziaływania g następuje kolaps krzywych χ do jednej uniwersalnej krzywej $\tilde{\chi}$ dla szerokiego zakresu znormalizowanych kształtów pułapki τ . Miejsce punktu przejścia λ_c , oraz wykładniki krytyczne są opisane w legendach odpowiednich wykresów. W zależności od liczby cząstek, wykładniki krytyczne mają różne wartości. W prawej kolumnie rysunku 5.7 jest pokazany drugi moment rozkładu σ po dokonaniu analogicznych operacji skalowania. Można zaobserwować, że także w tym wypadku następuje kolaps wszystkich punktów na wykresie do pewnej uniwersalnej krzywej $\tilde{\sigma}$. Powyższe wyniki sugerują, że przejście między różnymi uporządkowaniami wywołane adiabaticzną zmianą kształtu pułapki, w granicy silnych oddziaływań ma wiele własności znanych z teorii kwantowych przejść fazowych. To oznacza, że w granicy nieskończonego oddziaływania, dla określonego kształtu pułapki, układ ma jedno dobrze zdefiniowane uporządkowanie. W pobliżu punktu przejścia układ doznaje gwałtownego przejścia — jednocząstkowe gęstości zmieniają się tak, że po modyfikacji kształtu pułapki mają zupełnie inny typ uporządkowania. Warto zaznaczyć, że w przypadku jednowymiarowych układów zwykle spodziewamy się gładkich przejść [60, 102], a nie szybkich zmian własności układu. Z tego punktu widzenia przejście przewidziane w tym rozdziale jest rzadkim i interesującym zjawiskiem.

Komentarza może wymagać mała wartość parametru λ , w którym następuje przejście między różnymi rodzajami separacji profilu gęstości. Zostało sprawdzone, że nie jest to artefakt numeryczny, natomiast jego wartość jest ściśle powiązana ze skalami energii w układzie, które z kolei zależą od rozmiaru studni L , a więc położenia ścianek. Energia pojedynczego wzbudzenia maleje z kwadratem rozmiaru L , lecz jeżeli ściany są blisko siebie, a fermionów jest wiele, to zaburzony zostaje profil gęstości fermionów dla $\lambda = 1$. Stąd taki wybór parametrów, że przejście zachodzi dla niskich wartości λ . Zostało także sprawdzone, że efekt przejścia nie zależy od konkretnej parametryzacji potencjału (5.2). Zmiana kształtu zewnętrznego potencjału z oscylatora harmonicznego do studni prostokątnej nie jest jedynym możliwym sposobem wywołania

przejścia między porządkami.

Możliwa jest także inna realizacja tego zjawiska, ponieważ kluczowa jest zmiana skal energii wzbudzeń jednociałowych oraz energii oddziaływania wraz z kształtem pułapki. W doświadczeniu różne pierwiastki są umieszczane zwykle w pułapkach o różnych częstościach (częstość zależy między innymi od typu atomu). Częstości te mogą być modyfikowane w pewnym zakresie, a w związku z tym modyfikowane są skale energetyczne oraz rozkłady przestrzenne. Z tego powodu założenie w tej rozprawie tych samych częstości $\omega_{\downarrow} = \omega_{\uparrow}$ nie powoduje jakościowych zmian podczas badania niskich stanów zbudzonych, o ile obie częstości użyte w doświadczeniu mają wartości tego samego rzędu.

Rozdział 6

Ansatz interpolacyjny

Wyniki uzyskane w poprzednich rozdziałach były oparte na metodzie ścisłej diagonalizacji, która mimo swoich niekwestionowanych zalet cechuje się stosunkowo dużą złożonością obliczeniową. Z tego powodu wyznaczenie stanu podstawowego jest czasochłonne, zwłaszcza badanie stanów własnych w szerokim zakresie parametrów, np. oddziaływania g . W takich sytuacjach istnieje pokusa, aby skomplikowany problem kilkuciałowy opisać w bardzo prosty sposób.

Przykładem takiego podejścia jest użycie tzw. ansatzu interpolacyjnego (ang. *interpolatory ansatz*) zaproponowanego w pracy [41]. Ansatz jest oparty na założeniu, że stan podstawowy oddziałującego układu wielu ciał może być bardzo dokładnie przybliżony jako superpozycja pewnych dwóch stanów wielociałowych. Pierwszy to stan podstawowy układu nieoddziałującego, a drugi to stan podstawowy układu w granicy bardzo silnego odpychania. Ponieważ metoda została z powodzeniem zaadoptowana dla układów kwantowych dwóch i trzech cząstek (oraz dla pewnych układów polaronów zawierających do sześciu cząstek) [41], naturalnie pojawia się pytanie o zasadność zastosowania powyższego ansatzu dla większej liczby cząstek. Szczególnie ciekawym przypadkiem jest sytuacja, w której masy cząstek są różne. Niestety w tym wypadku znane w literaturze mapowanie Bose-Fermiego [45, 103, 104] nie może być zastosowane w celu znalezienia stanu podstawowego odpychających się fermionów. Niemniej znane jest półanalityczne wyrażenie na stan podstawowy układu czterech oddziałujących cząstek w granicy $g \rightarrow \infty$ o różnych masach [67]. W ogólności, właściwości stanu podstawowego dla skończonej wartości oddziaływania g nie mogą być znalezione analitycznie (niezależnie od stosunku mas składników μ) i należy użyć metod numerycznych lub przybliżonych. Aby odpowiedzieć na to pytanie porównamy przewidywania ansatzu interpolacyjnego z wynikami uzyskanymi drogą numeryczną ścisłej diagonalizacji hamiltonianu wielociałowego.

Część wyników przedstawiona w tym rozdziale dotycząca *metody ansatzu interpolacyjnego* została uzyskana w grupie Nikolaja Zinnera przez Amina Salami Dehkharghaniego w ramach współpracy z Uniwersytetem w Aarhus [4].

6.1 Badany układ

Rozważmy szczególny przypadek bezwymiarowego hamiltonianu (2.1) opisującego układ czterech cząstek $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 2$ w zewnętrznym potencjale harmonicznym. W tej konkretnej postaci hamiltonian (2.1) ma formę:

$$\begin{aligned}
 H &= H_{\downarrow} + H_{\uparrow} + H_{\uparrow\downarrow}, \\
 H_{\downarrow} &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{1}{2} (x_1^2 + x_2^2), \\
 H_{\uparrow} &= -\frac{1}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + \frac{\mu}{2} (y_1^2 + y_2^2), \\
 H_{\uparrow\downarrow} &= g [\delta(x_1 - y_1) + \delta(x_1 - y_2) + \delta(x_2 - y_1) + \delta(x_2 - y_2)].
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

Znalezienie stanu podstawowego $|\psi(g)\rangle$ tego typu hamiltonianu metodą ścisłej diagonalizacji było przedstawione i szeroko omówione w poprzednich rozdziałach.¹ Warto podkreślić, że istnieją także inne metody diagonalizacji wykorzystujące efektywne oddziaływanie, które działają bardzo dobrze w całym zakresie oddziaływań [69, 75], jednak te metody nie zostały jeszcze rozszerzone na przypadek cząstek o różnej masie.

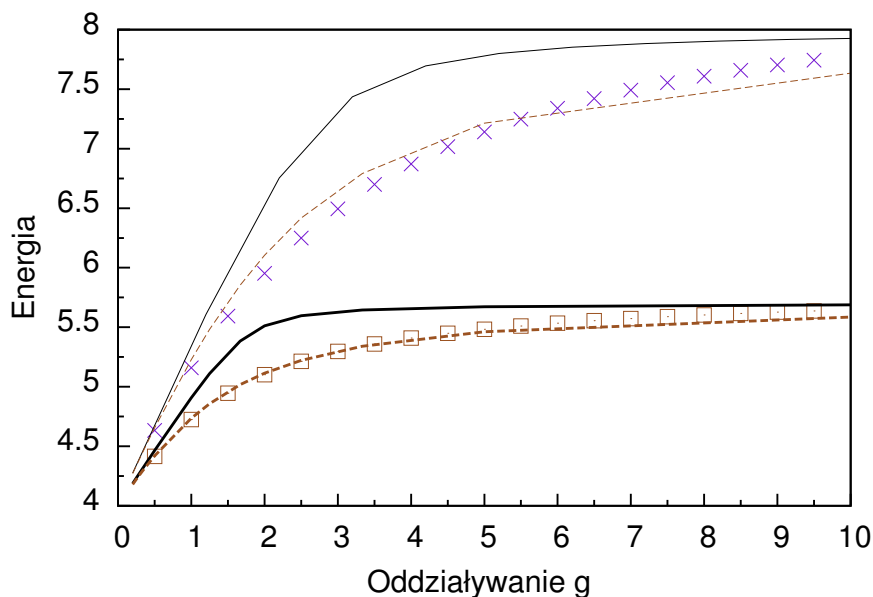
Ansatz interpolacyjny jest oparty na założeniu, że stan podstawowy układu $|\psi(g)\rangle$ dla dowolnego oddziaływania g może być dobrze przybliżony przez odpowiednią superpozycję stanu podstawowego dwóch granicznych przypadków, tzn.

$$|\psi(g)\rangle \approx |\Phi(g)\rangle = \alpha(g) |\Phi_0\rangle + \beta(g) |\Phi_{\infty}\rangle, \tag{6.2}$$

gdzie $|\Phi_0\rangle$ jest stanem podstawowym dla $g = 0$, a $|\Phi_{\infty}\rangle$ jest stanem podstawowym układu cząstek odpychających się nieskończenie silnie. Współczynniki $\alpha(g)$ oraz $\beta(g)$ są wyznaczone przez minimalizację wartości oczekiwanej hamiltonianu wielociałowego (6.1) w danym stanie wielociałowym: $\langle \Phi(g) | \hat{H} | \Phi(g) \rangle$. Zauważmy, że stany $|\Phi_0\rangle$ oraz $|\Phi_{\infty}\rangle$ zwykle nie są ortogonalne, stąd parametry wariacyjne $\alpha(g)$ oraz $\beta(g)$ nie spełniają naturalnych warunków normalizacyjnych, tzn. $|\alpha(g)|^2 + |\beta(g)|^2 \neq 1$. Dokładny opis otrzymywania parametrów wariacyjnych $\alpha(g)$ oraz $\beta(g)$ jest szczegółowo opisany w pracy [41].

Zaproponowany ansatz wydaje się być aż zbyt prosty, aby mógł działać poprawnie. Jednak jak zostało pokazane wcześniej, dla układów o równych masach cząstek w obu składnikach pozwala on wyznaczyć energie stanu podstawowego z zaskakująco dobrą dokładnością [41]. Oczywiście otwartym pytaniem, na które chcemy znaleźć odpowiedź w tym rozdziale jest to czy ansatz przewiduje poprawnie także inne własności stanu podstawowego. Dodatkowo, jesteśmy

¹W tym rozdziale będziemy badać jedynie stan podstawowy, więc pominiemy dla przejrzystości indeks dolny, tzn. zastosujemy oznaczenie $|\psi\rangle \equiv |\psi_0\rangle$.



Rysunek 6.1: Energia stanu podstawowego w funkcji oddziaływania g przewidziana przez ansatz interpolacyjny (6.2) (cienka oraz gruba linia ciągła dla stosunków mas odpowiednio $\mu = 1$ oraz $\mu = 10$) oraz numerycznie ścisłą diagonalizację hamiltonianu (krzyże oraz kwadraty dla odpowiednio $\mu = 1$ oraz $\mu = 10$). Przewidywania ansatzu są widocznie przeszacowanie, a zbieżność do dokładnych wyników raczej słaba. Linia przerywana odpowiada numerycznie poprawionemu ansatzowi, który daje dużo lepsze przewidywania energii. Energia jest dana w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$, a oddziaływanie w jednostkach $\sqrt{\hbar^3\omega/m_1}$.

zainteresowani przypadkiem, gdy cząstki różnych składników mają inne masy. Aby znaleźć ilościowe odpowiedzi na te pytania, wykonamy numerycznie ścisłą diagonalizację wielociałowego hamiltonianu (6.1), znajdziemy jego stan podstawowy $|\psi(g)\rangle$ w funkcji oddziaływania oraz porównamy własności stanu podstawowego z przewidywaniami ansatzu wariacyjnego.

Przyjmijmy, że wielociałową funkcję falową, która odpowiada stanom $|\Phi(g)\rangle$ oraz $|\psi(g)\rangle$, będziemy oznaczać w reprezentacji położeniowej odpowiednio jako $\Phi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)$ oraz jako $\psi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)$. Obie wielociałowe funkcje falowe spełniają następujące warunki wynikające z fermionowego charakteru składników \downarrow oraz \uparrow :

$$\begin{aligned}\Phi_g(x_1, x_2; y_1, y_2) &= -\Phi_g(x_2, x_1; y_1, y_2) = -\Phi_g(x_1, x_2; y_2, y_1), \\ \psi_g(x_1, x_2; y_1, y_2) &= -\psi_g(x_2, x_1; y_1, y_2) = -\psi_g(x_1, x_2; y_2, y_1).\end{aligned}\tag{6.3}$$

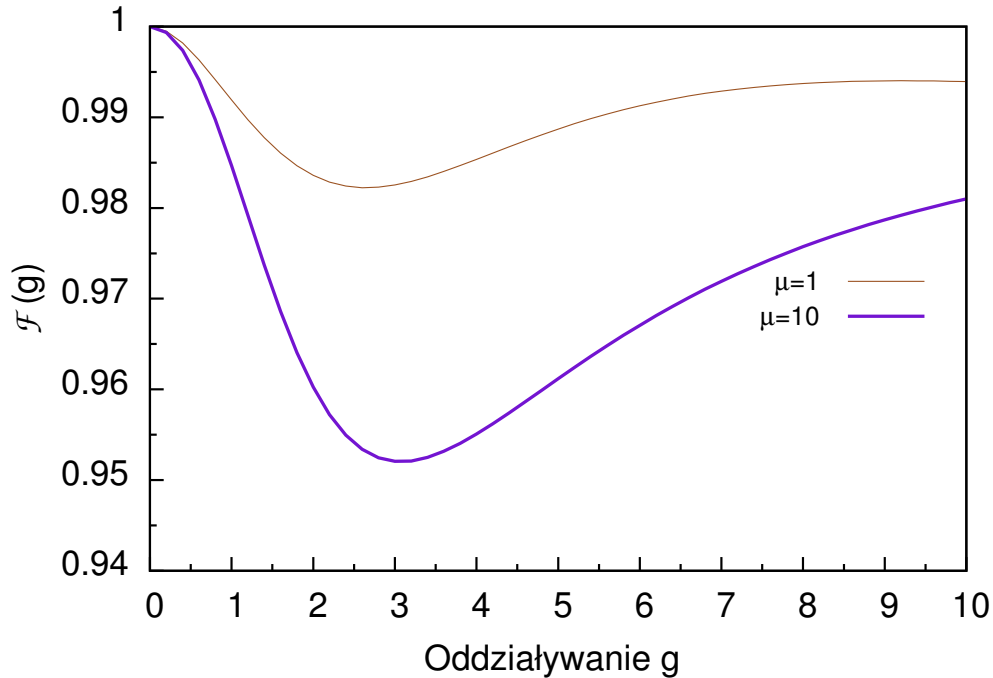
6.2 Ocena ansatzu interpolacyjnego

Ta sekcja jest poświęcona ocenie tego, jak dobrze wyznaczony jest stan podstawowy $|\Phi(g)\rangle$ w porównaniu ze ścisłym rozwiązaniem numerycznym $|\psi(g)\rangle$. Takie porównanie jest o tyle problematyczne, że nawet jeżeli funkcja falowa jest źle odtworzona, to niektóre obserwable mogą być poprawnie wyznaczone w ramach przybliżenia. Wtedy takie przybliżenie może mieć dużą wartość. Dlatego podstawą analizy poprawności ansatzu interpolacyjnego jest wyznaczenie różnych wielkości, które mogą być zmierzone w doświadczeniu oraz porównanie tych wielkości z wynikami uzyskanymi metodą ścisłej diagonalizacji. Zanim przejdziemy do bardziej wyrafinowanych testów, należy sprawdzić przewidywania wartości energii stanu podstawowego. Wielkość ta jest zawsze ograniczona od dołu przez dokładną wartość energii stanu podstawowego. Co więcej, może być mierzona doświadczalnie w układach kilku ultrazimnych cząstek z bardzo wysoką precyzją [13, 14].

Porównanie energii wyznaczonej za pomocą metody wariacyjnej oraz ścisłej diagonalizacji jest przedstawione na rysunku 6.1. Linia ciągła przedstawia przewidywania ansatzu wariacyjnego, podczas gdy krzyże oraz kwadraty odpowiadają wynikom uzyskanym ze ścisłej diagonalizacji (szczegóły w podpisie do rysunku 6.1). Jest oczywistym, że energie muszą być odtworzone w przypadkach granicznych $g = 0$ oraz $g \rightarrow \infty$ i to też jest widoczne na wykresie. Niemniej w reżimie średnich oddziaływań przewidywane przez ansatz energie są przeszacowane. Ten wynik może sugerować, że założenie, na którym oparta jest metoda, że stan podstawowy układu może być modelowany jako prosta superpozycja dwóch granicznych stanów wielociałowych, może nie być spełnione. Jednak ansatz wariacyjny, który został użyty może być zmodyfikowany tak, aby odtwarzać energię dużo dokładniej. Ogólnie rzecz biorąc, poprawienie metody polega na wykorzystaniu informacji o pochodnej energii stanu podstawowego $\left. \frac{dE}{dg} \right|_{g=\infty}$, którą można wyznaczyć za pomocą metod analitycznych. Bez wdawania się w szczegóły opisane w [41], poprawione wyniki otrzymane w ramach zmodyfikowanej metody wariacyjnej są zaprezentowane na rysunku 6.1 za pomocą linii przerywanych (cienka linia przerywana dla $\mu = 1$, a gruba linia przerywana dla $\mu = 10$). Widoczna jest zdecydowana poprawa wartości energii stanu podstawowego, chociaż kosztem utraty informacji o wielociałowej funkcji falowej stanu podstawowego [41].

Oczywiście metoda ścisłej diagonalizacji także nie jest pozbawiona wad, np. występują problemy z dokładnością w granicy silnych oddziaływań. Jest to związane z faktem, że energie zbiegają bardzo powoli do dokładnej wartości wraz ze zwiększaniem obciążenia bazy jednociłowej N_{MAX} . Jednak pełna kontrola nad zbieżnością jest możliwa i można wyznaczyć błąd systematyczny związany z numerycznymi przybliżeniami. W przypadku, gdy zbieżność jest bardzo niska, przydatność prostego ansatzu interpolacyjnego jest niezwykle użyteczna.

Dla każdej metody wariacyjnej mającej na celu wyznaczenie wielociałowego stanu podstawowego, sama zbieżność energii nie jest wystarczająca, aby stwierdzić że stan kwantowy został dobrze odtworzony. Jedną z metod stwierdzenia czy stan kwantowy został w pełni odtworzony

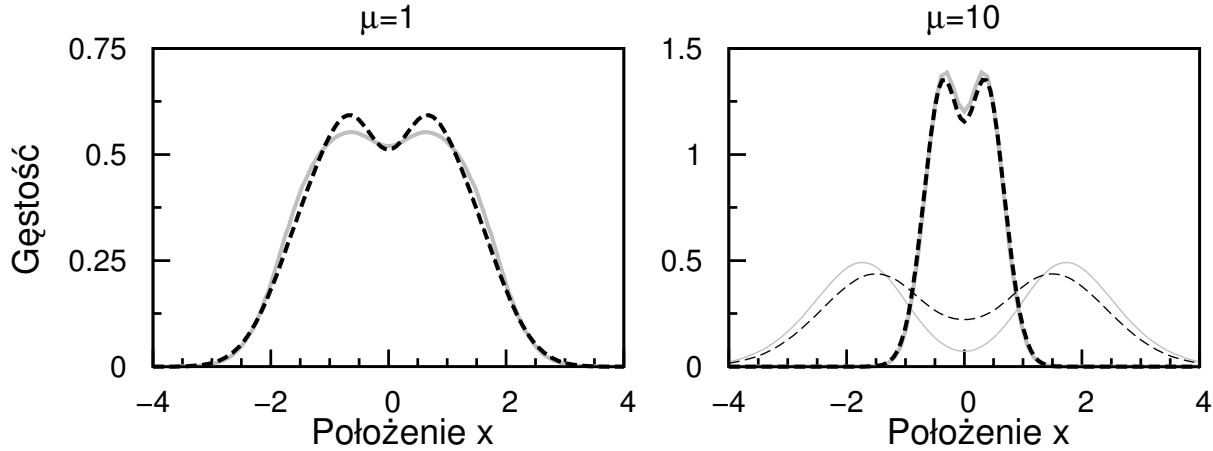


Rysunek 6.2: Wierność $\mathcal{F}(g)$ między funkcjami falowymi $|\Phi(g)\rangle$ oraz $|\psi(g)\rangle$ stanu podstawowego otrzymanego za pomocą metody wariacyjnej oraz za pomocą ścisłej diagonalizacji hamiltonianu (6.1) (cienka i gruba linia dla układu o stosunku mas odpowiednio $\mu = 1$ oraz $\mu = 10$). Z definicji ansatzu (6.2) wynika, że w granicznym przypadku bardzo silnych oddziaływań oraz braku oddziaływania wierność jest równa 1, co jest widoczne na rysunku. Dla skończonych oddziaływań, gdzie przewidywania ansatzu nie są dokładne, wierność spada. Wyniki te sugerują, że dla układu o różnych masach niepewność jest większa niż w przypadku równych mas. Oddziaływanie jest mierzone w jednostkach $\sqrt{\hbar^3 \omega / m_1}$.

jest wyznaczenie wierności (ang. *fidelity*), tzn. rzutu przybliżonego stanu $|\Phi(g)\rangle$ na wielociałowy stan podstawowy $|\psi(g)\rangle$ otrzymany w wyniku metody ścisłej diagonalizacji:

$$\mathcal{F}(g) = |\langle \Phi(g) | \psi(g) \rangle|. \quad (6.4)$$

Naturalnie wielkość \mathcal{F} ma tę własność, że $\mathcal{F}(0) = 1$ oraz $\mathcal{F}(\infty) = 1$. Dla skończonych oddziaływań wierność jest mniejsza niż 1 i jest przedstawiona na rysunku 6.2. Zaskakująco, dla fermionów o równych masach, $\mu = 1$ (cienka linia), wierność \mathcal{F} jest bliska jedności dla dowolnego oddziaływania, tzn. funkcja falowa stanu podstawowego jest odtworzona bardzo dobrze. W najgorszym wypadku, dla oddziaływania $g \approx 2$, wierność nie spada poniżej 98%. Jeżeli jednak stosunek mas w mieszaninie wzrasta (gruba linia), przewidywania ansatzu stają się gorsze dla skończonych oddziaływań. Niemniej wierność \mathcal{F} nadal pozostaje stosunkowo duża. Jak widać,



Rysunek 6.3: Jednociałowy profil gęstości dla oddziaływania $g = 2$, wyznaczone z dokładnego stanu podstawowego (linie ciągłe) oraz z wariacyjnego stanu podstawowego (linie przerywane). Profile gęstości są całkiem dobrze odtworzone metodą ansatzu zarówno dla układu o równych masach $\mu = 1$ (lewy panel) jak i dla układu o różnych masach $\mu = 10$ (prawy panel). W drugim przypadku przewidywania są znacznie lepsze dla cięższego składnika (grube linie) niż dla lżejszego składnika (cienkie linie). Porównanie profili dla lżejszych składników sugeruje, że jednociałowa gęstość przechodzi separację, która w rzeczywistości jest bardziej gwałtowna niż przewidziana przez metodę wariacyjną dla tej samej wartości oddziaływania. Położenia i gęstości są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_1\omega)}$ oraz $\sqrt{m_1\omega/\hbar}$.

dla stosunku mas $\mu = 10$ nie spada ona poniżej 95%. Ta obserwacja sugeruje, że pewne wielkości wyznaczone z przybliżonej funkcji falowej stanu podstawowego $|\Phi(g)\rangle$ mogą mieć wartości bliskie do tych otrzymanych metodą dokładną. Aby sprawdzić tę hipotezę porównamy przewidywania wartości różnych obserwabli wyznaczone metodą ansatzu interpolacyjnego oraz metodą ścisłej diagonalizacji.

Przestrzenny profil gęstości cząstek danego składnika może być mierzony bezpośrednio w doświadczeniach. Typowo jest to robione przez powtarzanie i uśrednianie jednoczesnego pomiaru położenia wszystkich cząstek. W granicy nieskończonej liczby pomiarów, otrzymane zostaną teoretyczne wielkości, które można wyznaczyć z wielociałowej funkcji falowej (poniższe definicje są tożsame z definicją (2.21)):

$$\rho_1(x_1) = \int dx_2 \int dy_1 \int dy_2 |\psi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)|^2, \quad (6.5a)$$

$$\rho_1(y_1) = \int dx_1 \int dx_2 \int dy_2 |\psi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)|^2. \quad (6.5b)$$

Profile gęstości (6.5) mogą być bezpośrednio porównane z profilami gęstości wyznaczonymi ze stanu podstawowego układu $|\Phi(g)\rangle$ otrzymanego metodą wariacyjną. Ponieważ ansatz opiera się na dokładnych funkcjach falowych w granicznych przypadkach ($g = 0$ i $g = \infty$) to przewi-

dywania obu metod muszą się pokrywać. Jeżeli istnieją jakiegokolwiek rozbieżności między przewidywaniami, można się ich spodziewać w rejonie oddziaływań, w którym wierność $\mathcal{F}(g)$ jest znacząco mniejsza od jedności. Na rysunku 6.3 pokazane są profile gęstości wyznaczone dla funkcji $|\Phi(g)\rangle$ oraz $|\psi(g)\rangle$ dla oddziaływania $g = 2$, gdzie ansatz interpolacyjny jest najmniej dokładny (zobacz rysunek 6.2). W przypadku równych mas $\mu = 1$ (lewy panel na rysunku 6.3), dokładny profil gęstości jest bardziej płaski niż profil otrzymany za pomocą metody wariacyjnej. To oznacza, że dla niewielkich oddziaływań w funkcji falowej $|\Phi(g)\rangle$ przeszacowany jest wkład od nieoddziałującej wielociałowej funkcji falowej $|\Phi_0\rangle$.

Gdy wprowadzamy asymetrię mas (prawy panel na rysunku 6.3), przewidywany za pomocą ansatzu profil gęstości cięższego składnika ma kształt bliski dokładnemu profilowi gęstości. Jednocześnie profil gęstości lżejszego składnika jest wyznaczony mniej dokładnie niż dla równych mas ($\mu = 1$). Sprawdziliśmy, że ten scenariusz jest bardzo ogólny i nie zależy od statystyki, tzn. wyniki są analogiczne, gdy zaadoptujemy metodę wariacyjną dla mieszanin bozonowo-bozowych oraz bozonowo-fermionowych.

Mimo że profile gęstości przewidziane przez ansatz wariacyjny różnią się od dokładnych wyników, te różnice są w zasadzie niewielkie i nie powinny być istotne przy porównywaniu z wynikami doświadczalnymi. Okazuje się, że jest tak ze wszystkimi pomiarami jednociąłowymi, których wyniki zakodowane są w jednociąłowej macierzy gęstości. Aby potwierdzić tę hipotezę można porównać pełne jednociąłowe macierze gęstości $\tilde{\rho}_\sigma$:

$$\tilde{\rho}_1(x_1, x_2) = \int dy_1 \int dy_2 |\Phi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)|^2, \quad (6.6a)$$

$$\tilde{\rho}_1(y_1, y_2) = \int dx_1 \int dx_2 |\Phi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)|^2, \quad (6.6b)$$

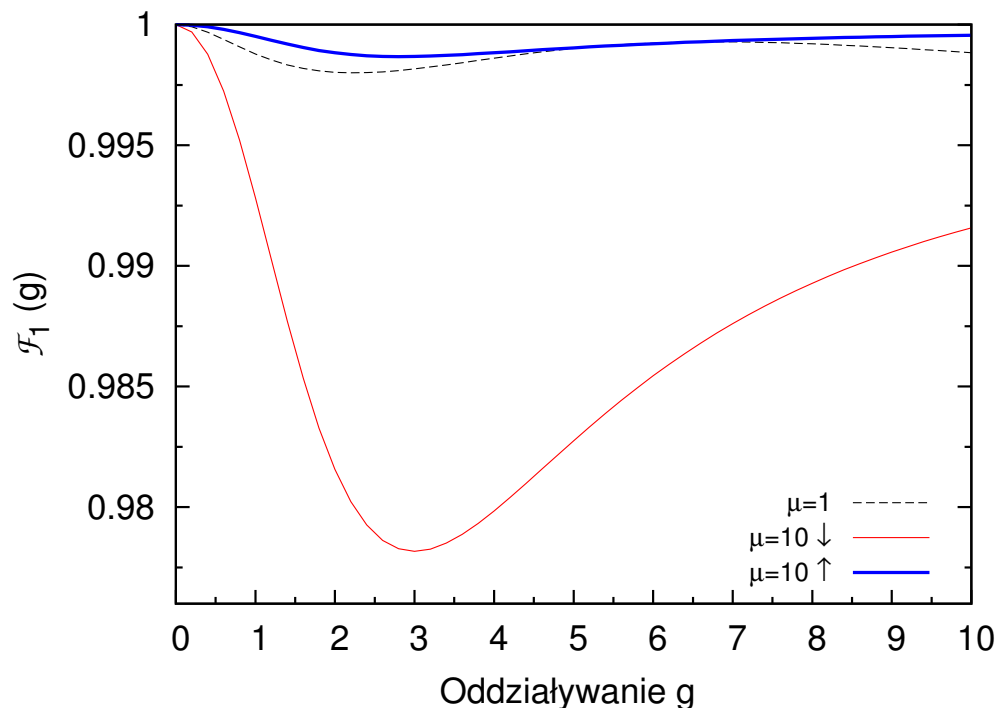
z ich odpowiednikami wyznaczonymi z dokładnego stanu podstawowego $|\psi(g)\rangle$. Ilościowe porównanie jest możliwe poprzez wyliczenie jakiejś wielkości, która określa jak dwa stany mieszane są od siebie odległe. Taką wielkością jest np. wierność $\mathcal{F}_1(g)$ zdefiniowana następująco:

$$\mathcal{F}_1(g) = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho} \rho' \sqrt{\rho}} \right], \quad (6.7)$$

gdzie ρ i ρ' to macierze gęstości, które są porównywane. Wielkość ta ma analogiczne własności do wierności $\mathcal{F} = |\langle \psi | \psi' \rangle|$ zdefiniowanej dla stanów czystych. Dodatkowo, jeśli macierze gęstości reprezentują stany czyste, tzn. $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ i $\rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'|$, to zachodzi tożsamość

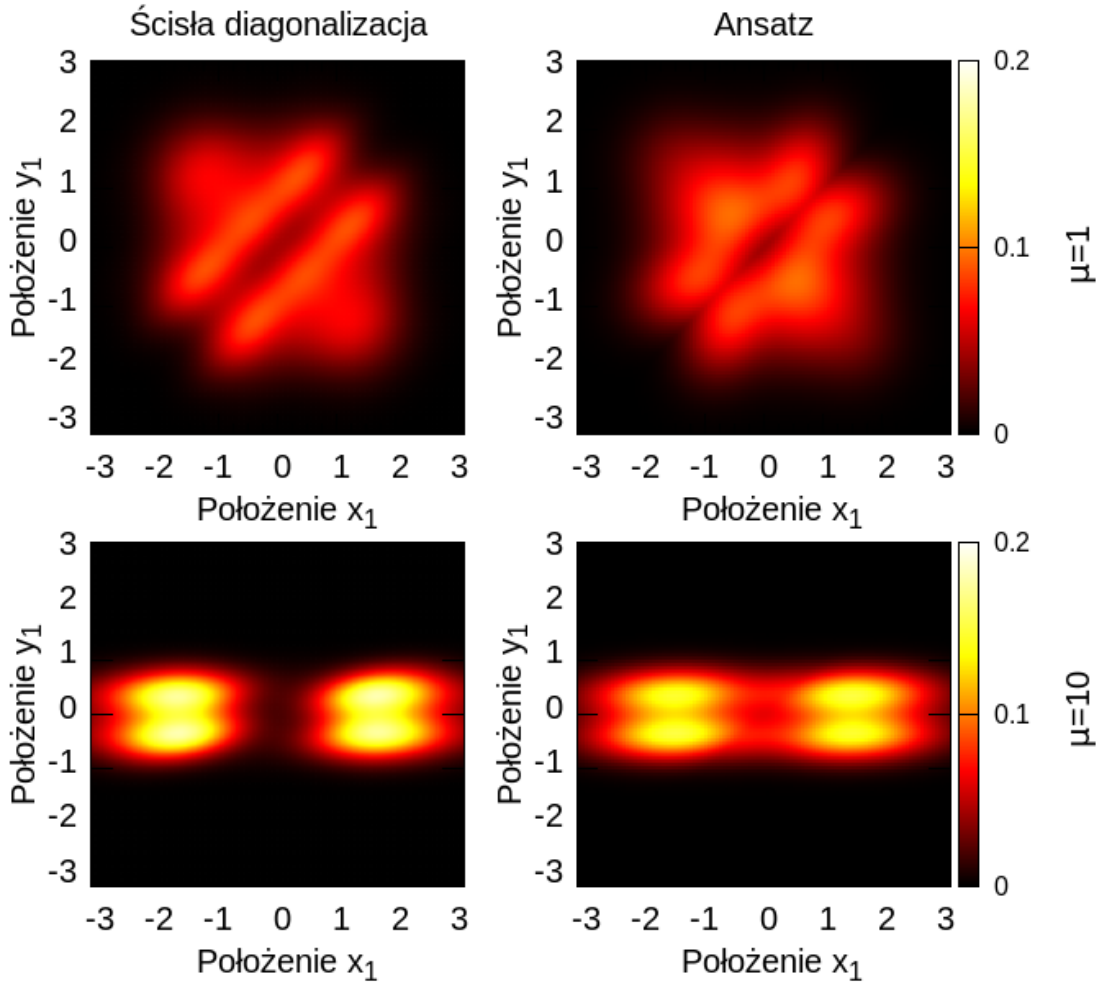
$$\mathcal{F}_1 = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho} \rho' \sqrt{\rho}} \right] = |\langle \psi | \psi' \rangle|. \quad (6.8)$$

Na rysunku 6.4 przedstawiono wierność jednociąłową \mathcal{F}_1 w funkcji oddziaływania. Czarna przerywana linia przedstawia wynik dla przypadku równych mas (ze względu na symetrię wy-



Rysunek 6.4: Wierność $\mathcal{F}_1(g)$ wyznaczona za pomocą pełnych jednociałowych macierzy gęstości: na podstawie dokładnego stanu $|\psi(g)\rangle$ oraz na podstawie stanu wariacyjnego $|\Phi(g)\rangle$. Czarna przerywana linia przedstawia wynik otrzymany dla obu składników, gdy ich masy są równe $\mu = 1$. Przypadek różnych mas ($\mu = 10$) jest przedstawiony za pomocą grubej niebieskiej oraz czerwonej linii, odpowiednio dla cięższego oraz lżejszego składnika. Oś pionowa ma dużo węższy zakres niż wierność \mathcal{F} przedstawiona na rysunku 6.2, co oznacza, że na poziomie jednociałowym wyniki są dużo bardziej zgodne niż wynikałoby to z obserwacji wierności \mathcal{F} . Oddziaływanie jest mierzone w jednostkach $\sqrt{\hbar^3 \omega / m_1}$.

nik ten nie zależy od rodzaju składnika). W przypadku mieszaniny o stosunku mas $\mu = 10$ wierność jest wykreślona za pomocą grubej niebieskiej oraz cienkiej czerwonej linii dla odpowiednio składnika cięższego oraz lżejszego. Rysunek ten zgadza się z prawym panelem rysunku 6.3 potwierdzając tym samym obserwację, że wielkości jednociałowe wyznaczone dla cięższego składnika będą bardziej dokładne niż w przypadku układu o tych samych masach. Z drugiej strony dokładność obserwacji jednociałowych dla lżejszego składnika mocno spada. Warto zwrócić uwagę na to, że oś pionowa na rysunku 6.4 przedstawia dużo mniejszy zakres niż oś na rysunku 6.2. To oznacza, że wierność $\mathcal{F}_1(g)$ wyznaczona z jednociałowych macierzy gęstości ma wyższą wartość niż $\mathcal{F}(g)$. Oznacza to, że proponowane wariacyjne funkcje falowe $\Phi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)$ mogą być bezpiecznie używane do przewidywania dowolnych własności jednocząstkowych układu o tych samych lub różnych masach. Wynik ten sugeruje także, że wyższe funkcje korelacji mogą być dużo gorzej odtworzone przez ansatz.



Rysunek 6.5: Dwuciałowy profil gęstości $C(x_1, y_1)$ obliczony w stanie podstawowym układu dla różnych fermionów za pomocą obydwu metod dla oddziaływania $g = 2$. Przewidywania metody wariacyjnej (prawe panele) są zbieżne z przewidywaniami ścisłej diagonalizacji (lewe panele) zarówno dla tych samych mas $\mu = 1$ (górne panele) jak i dla układów o różnych masach $\mu = 10$ (dolne panele). Jednak w przypadku ansatzu prawdopodobieństwo znalezienia obu fermionów w środku pułapki jest przeszacowane. Ta obserwacja ma także konsekwencje w jednociałowych profilach (prawy panel na rysunku 6.3), gdzie niedokładna separacja gęstości jest przewidziana za pomocą metody wariacyjnej. Położenia i gęstości dwuciałowe są mierzone odpowiednio w $\sqrt{\hbar/(m_1\omega)}$ oraz $m_1\omega/\hbar$.

Naturalnym, kolejnym krokiem oceny ansatzu jest porównanie korelacji międzycząstkowych, które wykraczają poza opis jednociałowej macierzy gęstości. Korelacje tego typu są z reguły czułe na zmiany wielociałowej funkcji falowej, więc nie jest oczywistym, że ansatz interpolacyjny odtwarza korelacje wielociałowe poprawnie. Skoncentrujemy się zatem na najprostszej korelacji dwuciałowej tzn. profilu gęstości dwuciałowej $C(x_1, y_1)$ pomiędzy składnikami (zobacz

definicję (2.22)), który dla układu czterech ciał sprowadza się do:

$$C(x_1, y_1) = \int dx_2 \int dy_2 |\psi_g(x_1, x_2; y_1, y_2)|^2. \quad (6.9)$$

Profile gęstości dwuciałowej oddziałującego układu czterech fermionów o równych oraz różnych masach są przedstawione odpowiednio na górnych i dolnych panelach rysunku 6.5. Tak jak w przypadku profilów gęstości jednociiałowej, zaprezentowane wyniki są otrzymane dla oddziaływania $g = 2$ odpowiadającego najniższej wartości wierności \mathcal{F} . Można zauważyć, że wyniki uzyskane za pomocą metody wariacyjnej są jakościowo zgodne z wynikami ścisłymi. Niemniej widoczne są pewne różnice, zwłaszcza dla układu o różnej masie $\mu = 10$. Po pierwsze, profile gęstości par uzyskane metodą ansatzu są bardziej rozmyte niż profile otrzymane metodą ścisłej diagonalizacji. Dodatkowo, dla układu o różnych masach, dokładne prawdopodobieństwo znalezienia obu cząstek w środku pułapki, w przeciwieństwie do przewidywań metody wariacyjnej, gwałtownie spada do zera dla większego stosunku mas μ . Ta obserwacja jest w zasadzie jedyną, która sprawia, że wyniki eksperymentalne mogą znacząco różnić się od przewidywań ansatzu wariacyjnego.

Jednym z mniej oczywistych sposobów porównywania wyników otrzymanych różnymi metodami jest sprawdzanie przewidywań obsadzeń jednociiałowych orbitali modelu nieoddziałującego (2.9). Aby te obsadzenia wyznaczyć, wygodnie się posłużyć wektorami wielociiałowymi $|kl; mn\rangle$ zdefiniowanymi za pomocą orbitali jednociiałowych $\varphi_{k\sigma}$:

$$|kl; mn\rangle := \mathcal{A} \left\{ \varphi_{k\downarrow}(x_1) \varphi_{l\downarrow}(x_2) \varphi_{m\uparrow}(y_1) \varphi_{n\uparrow}(y_2) \right\}, \quad (6.10)$$

gdzie $\mathcal{A}\{\cdot\}$ jest operatorem antysymetryzacji w odpowiedniej podprzestrzeni nierozróżnialnych fermionów i zapewnia że:

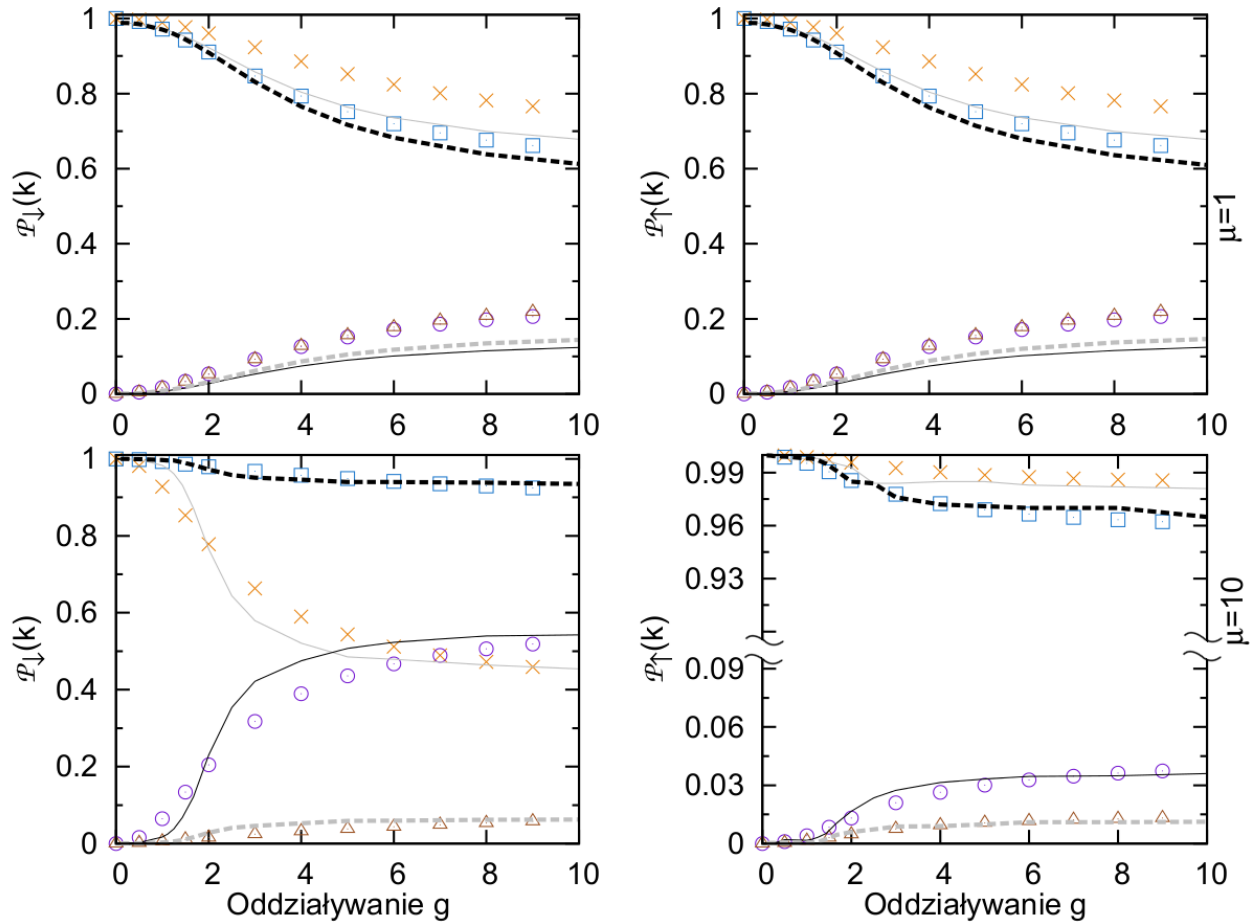
$$|kl; mn\rangle = -|lk; mn\rangle = -|kl; nm\rangle. \quad (6.11)$$

W związku z powyższym obsadzenia jednociiałowe orbitali dla stanu podstawowego układu $|\psi(g)\rangle$ wyznaczonego ściśle są zdefiniowane jako:

$$\mathcal{P}_\uparrow(k) = \sum_{lmn} |\langle kl; mn|\psi(g)\rangle|^2, \quad (6.12a)$$

$$\mathcal{P}_\downarrow(m) = \sum_{kln} |\langle kl; mn|\psi(g)\rangle|^2. \quad (6.12b)$$

Dla stanu podstawowego $|\Phi(g)\rangle$ uzyskanego za pomocą ansatzu definicje są analogiczne. Wielkości (6.12) są bardzo ważne, ponieważ mogą być one mierzone doświadczalnie w układach ultrazimnych atomów przez odpowiednią zmianę kształtu zewnętrznego potencjału [17]. Stąd dokładne odtworzenie tej wielkości przez ansatz może być ważne z eksperymentalnego punktu widzenia.



Rysunek 6.6: Prawdopodobieństwa $\mathcal{P}_\downarrow(k)$ oraz $\mathcal{P}_\uparrow(k)$ znalezienia pojedynczego fermionu w danym orbitalu jednocząstkowym k w funkcji oddziaływania g . Przewidywania metody wariacyjnej (linia szara ciągła dla $k = 0$, czarna przerywana dla $k = 1$, czarna ciągła dla $k = 2$ oraz szara przerywana dla $k = 3$) są mniej więcej zgodne z wynikami ścisłej diagonalizacji (krzyże dla $k = 0$, kwadraty dla $k = 1$, okręgi dla $k = 2$ oraz trójkąty dla $k = 3$). W granicy znikającego oddziaływania g fermiony mogą być znalezione jedynie w dwóch najniższych orbitalach $k = 0$ oraz $k = 1$. Gdy oddziaływania są obecne, inne orbitale jednocząstkowe kontrybuują do stanu podstawowego układu. Niemniej dla układów z asymetrią mas i silnych oddziaływań, metoda wariacyjna przewiduje zbyt szybki spadek wkładu do orbitalu podstawowego poniżej wkładu drugiego wzbudzonego orbitalu. Oddziaływanie jest mierzone w jednostkach $\sqrt{\hbar^3 \omega / m_\downarrow}$.

Na rysunku 6.6 przedstawiamy prawdopodobieństwa (6.12) wyznaczone dla kilku najniższych jednociąłowych stanów w funkcji oddziaływania g dla równych mas $\mu = 1$ (górne panele) oraz różnych mas $\mu = 10$ (dolne panele). Wyniki oparte na metodzie wariacyjnej (linie ciągłe i przerywane) są porównane z prawdopodobieństwami otrzymanymi za pomocą metody ścisłej diagonalizacji (kwadraty, krzyże, etc.). Oczywiście, w przypadku układu o równych masach, oba rodzaje fermionów mają dokładnie te same prawdopodobieństwa $\mathcal{P}_\downarrow(k) = \mathcal{P}_\uparrow(k)$. W przypadku

braku oddziaływania $g = 0$, cząstki mogą być znalezione tylko w dwóch najniższych stanach (odpowiednio szare ciągłe linie oraz krzyże lub czarne przerywane linie oraz kwadraty dla stanów z $k = 0$ lub $k = 1$). Wraz ze wzrostem oddziaływania, oba prawdopodobieństwa zmniejszają się i wyższe stany jednociąłowe są częściowo obsadzone. W tym przypadku przewidywania metody wariacyjnej, mimo że niedoskonałe, odtwarzają wyniki metody ścisłej całkiem dobrze.

Sytuacja zmienia się wyraźnie, gdy rozważamy mieszaninę różnych mas. W takim przypadku, przewidywania obu metod są zgodne tylko dla cięższego składnika. Dla lżejszego składnika obsadzenie niższych orbitali jednociąłowych spada zbyt wolno dla małych oddziaływań. Z drugiej strony dla silniejszych oddziaływań (w pobliżu $g = 2$) spadek obsadzeń jest za szybki. Ponadto zgodnie z przewidywaniami ansatzu dla pewnej wartości oddziaływania obsadzenie orbitalu podstawowego jest mniej prawdopodobne niż obsadzenie trzeciego stanu jednociąłowego (dla oddziaływania $g \approx 5$), podczas gdy metoda ścisłej diagonalizacji wskazuje, że równe obsadzenia występują przy oddziaływaniu większym, tzn. $g \approx 7$. Niemniej różnice między przewidywaniami ścisłej diagonalizacji, a podejściem wariacyjnym nie powinny być istotne w kontekście eksperymentalnym. To oznacza, że także w wypadku różnych mas układów, ansatz wariacyjny może być z powodzeniem użyty do jakościowego opisu obsadzeń orbitali jednocząstkowych.

6.3 Konkluzje

W tym rozdziale porównane zostały przewidywania ansatzu interpolacyjnego wprowadzonego w pracy [41] z metodą ścisłej diagonalizacji hamiltonianu wielociąłowego (6.1) dla układu czterech cząstek. Zaskakująco proste założenie, że stan podstawowy fermionów może być przybliżony za pomocą superpozycji jedynie dwóch stanów wielociąłowych opisuje dobrze wiele własności takiego układu kilku cząstek. Jest to prawda zarówno dla układu o równych masach jak i o różnych masach. Oczywiście tak prosty ansatz nie działa doskonale w pełnym zakresie oddziaływań, ale odchylenia od dokładnych wartości obserwabli są niewielkie.

Mimo, że zaprezentowane wyniki dotyczą mieszanin fermionowych, aby uzyskać szerszy ogląd problemu ansatzu wariacyjnego, warto rozważyć różne rodzaje mieszanin czterech cząstek. Obie metody, tzn. ansatz wariacyjny oraz podejście ścisłej diagonalizacji, może być łatwo zaadoptowane do mieszanin dwóch rodzajów bozonów lub mieszaniny bozonów z fermionami. Formalnie jedyną różnicą jest zadbanie by odpowiednie warunki (anty)przemienności (6.11) były nałożone na wielociąłową funkcję falową. Te niewielkie zmiany często mają decydujący wpływ na otrzymane wyniki. Silnie oddziałujące stany o równych masach w mieszaninach Bose-Fermiego były tematem badań w ostatnim czasie [105–107].

Aby zwiększyć dokładność przewidywań można skonstruować wariacyjną funkcję próbną (6.2), rozszerzoną o dodatkowy stan wielociąłowy. Na przykład o stan podstawowy $|\Phi_2\rangle$ otrzymany dla

oddziaływania $g = 2$, w którym dokładność jest niska:

$$|\Phi(g)\rangle = \alpha(g)|\Phi_0\rangle + \beta(g)|\Phi_\infty\rangle + \gamma(g)|\Phi_2\rangle. \quad (6.13)$$

Mimo, że takie rozszerzenie jest możliwe, zawiera ono trudność w postaci znalezienia dodatkowego stanu wielociałowego $|\Phi_2\rangle$, które zwykle musi być wykonane nie analitycznie, lecz za pomocą metod numerycznych. Poza tym, problem minimalizacji staje się bardziej skomplikowany. To sprawia, że całe piękno i prostota idei użytego ansatzu znika. Niemniej ten kierunek rozwoju może być nieunikniony, jeżeli będziemy chcieli rozważyć większą liczbę cząstek.

Podsumowanie

W rozprawie zostało pokazane, że *różnica mas ultrazimnych fermionów w dwuskładnikowej mieszaninie zasadniczo zmienia własności układu, prowadząc do zupełnie nowych zjawisk*. Dzięki zastosowaniu numerycznej metody ścisłej diagonalizacji zostały znalezione widma energetyczne oraz wielociałowe stany własne hamiltonianu układu kilku silnie oddziałujących cząstek.

Pokazano, że układy fermionów o różnych masach posiadają obniżoną symetrię ze względu na zamianę cząstek, co powoduje częściowe zniesienie degeneracji w widmie energetycznym w granicy silnych oddziaływań. Dla fermionów uwięzionych w pułapce harmoniczej możliwe jest odseparowanie ruchu środka masy układu od ruchu względnego. Tę własność wykorzystano do badania widma układu fermionów otrzymanego w układzie środka masy, a także do zdefiniowania niezmienników, które mogą być przydane do klasyfikowania stanów kwantowych.

Efekt różnych mas jest widoczny nie tylko na poziomie widma wielociałowego, ale także w jednociałowych profilach gęstości stanu podstawowego. W pułapce harmoniczej, w stanie podstawowym ciężkie fermiony pozostają w środku, natomiast lekkie dzielą się na dwie części i są wypychane na zewnątrz pułapki. Co więcej, separacja zachodzi nie tylko w stanie podstawowym, ale może być zaobserwowana w przypadku występowania niedoskonałości przygotowania stanu podstawowego. Obecność niedoskonałości zostało modelowane za pomocą stanu termicznego. Podobne zjawisko separacji przestrzennej występuje także w układzie fermionów umieszczonych w potencjale jednowymiarowej studni prostokątnej. Jednak w tym wypadku separacja ma inny charakter: to lekkie cząstki pozostają w środku, a ciężkie dzielą się i zostają wypchnięte na zewnątrz pułapki.

Następnie pokazano, że zmieniając adiabaticznie kształt zewnętrznej pułapki ze studni prostokątnej do oscylatora harmonicznego, typ separacji przestrzennej stanu podstawowego ulega zmianie. Im silniejsze jest odpychanie w układzie cząstek, tym przejście między uporządkowaniami jest gwałtowniejsze. Wykazaliśmy, że badane przejście między dwoma typami uporządkowania wykazuje podobieństwo do kwantowych przejść fazowych. Dzięki temu można je analizować wykorzystując techniki znane z teorii kwantowych przejść fazowych. Metody te pozwalają na wyznaczenie krytycznego kształtu pułapki, dla którego w granicy nieskończonego odpychania zachodzi zmiana typu separacji.

W ostatniej części rozprawy zbadano dokładność znanej w literaturze metody, tzw. *ansatzu*

interpolacyjnego, pozwalającej na wyznaczenie przybliżonego stanu podstawowego dla skończonych oddziaływań. W tym celu porównano dla przypadku czterech cząstek przybliżony stan podstawowy ze stanem wyznaczonym metodą ścisłej diagonalizacji. Dokładność ansatzu została zweryfikowana przez porównanie wielkości, które mogą mieć znaczenie eksperymentalne. W rozprawie pokazano, że układ czterech cząstek może być z powodzeniem opisany jako superpozycja wielociałowego stanu nieoddziałującego oraz stanu w granicy nieskończonego odpychania, o ile interesują nas jedynie obserwable jednociłowe. Nowa metoda musi być używana ostrożnie, jeżeli jesteśmy zainteresowani wyższymi funkcjami korelacji. Niemniej, biorąc pod uwagę prostotę ansatzu, może być on być bardzo przydatny.

Zaprezentowane w rozprawie wyniki jednoznacznie pokazują, że różne masy atomów poszczególnych składników w mieszaninie fermionów zmieniają własności układu i są bezpośrednio przyczyną nowych zjawisk.

Bibliografia

- [1] D. Pęczak, M. Gajda, T. Sowiński, *Experimentally accessible invariants encoded in interparticle correlations of harmonically trapped ultra-cold few-fermion mixtures*, arXiv preprint arXiv:1703.08116 (2017).
- [2] D. Pęczak, M. Gajda, T. Sowiński, *Two-flavour mixture of a few fermions of different mass in a one-dimensional harmonic trap*, *New J. Phys.* **18**, 013030 (2016).
- [3] D. Pęczak, T. Sowiński, *Few strongly interacting ultracold fermions in one-dimensional traps of different shapes*, *Phys. Rev. A* **94**, 042118 (2016).
- [4] D. Pęczak, A. S. Dehkharghani, N. T. Zinner, T. Sowiński, *Four fermions in a one-dimensional harmonic trap: Accuracy of a variational-ansatz approach*, *Phys. Rev. A* **95**, 053632 (2017).
- [5] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Vol. 1 (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [6] D. Wineland, H. Dehmelt, in *Bulletin of the American Physical Society*, Vol. 20 (1975) pp. 637–637.
- [7] T. W. Hänsch, A. L. Schawlow, *Cooling of gases by laser radiation*, *Optics Communications* **13**, 68 (1975).
- [8] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor*, *Science* **269**, 198 (1995).
- [9] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. Van Druten, D. Durfee, D. Kurn, W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (1995).
- [10] C. J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).
- [11] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems* (Oxford University Press, Oxford, 2012).

- [12] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T. Ottenstein, A. Wenz, S. Jochim, *Deterministic Preparation of a Tunable Few-Fermion System*, *Science* **332**, 336 (2011).
- [13] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A. N. Wenz, M. G. Ries, J. E. Bohn, S. Jochim, *Fermionization of Two Distinguishable Fermions*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 075303 (2012).
- [14] A. Wenz, G. Zürn, S. Murmann, I. Brouzos, T. Lompe, S. Jochim, *From Few to Many: Observing the Formation of a Fermi Sea One Atom at a Time*, *Science* **342**, 457 (2013).
- [15] G. Zürn, A. N. Wenz, S. Murmann, A. Bergschneider, T. Lompe, S. Jochim, *Pairing in Few-Fermion Systems with Attractive Interactions*, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 175302 (2013).
- [16] S. Murmann, A. Bergschneider, V. M. Klinkhamer, G. Zürn, T. Lompe, S. Jochim, *Two Fermions in a Double Well: Exploring a Fundamental Building Block of the Hubbard Model*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 080402 (2015).
- [17] S. Murmann, F. Deuretzbacher, G. Zürn, J. Bjerlin, S. M. Reimann, L. Santos, T. Lompe, S. Jochim, *Antiferromagnetic Heisenberg Spin Chain of a Few Cold Atoms in a One-Dimensional Trap*, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 215301 (2015).
- [18] A. M. Kaufman, B. J. Lester, M. Foss-Feig, M. L. Wall, A. M. Rey, C. A. Regal, *Entangling two transportable neutral atoms via local spin exchange*, *Nature* **527**, 208 (2015).
- [19] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, S. Kuhr, *Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator*, *Nature* **467**, 68 (2010).
- [20] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Foelling, L. Pollet, M. Greiner, *Probing the superfluid-to-mott insulator transition at the single-atom level*, *Science* **329**, 547 (2010).
- [21] A. Omran, M. Boll, T. A. Hilker, K. Kleinlein, G. Salomon, I. Bloch, C. Gross, *Microscopic Observation of Pauli Blocking in Degenerate Fermionic Lattice Gases*, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 263001 (2015).
- [22] M. F. Parsons, F. Huber, A. Mazurenko, C. S. Chiu, W. Setiawan, K. Wooley-Brown, S. Blatt, M. Greiner, *Site-Resolved Imaging of Fermionic ^6Li in an Optical Lattice*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 213002 (2015).
- [23] G. J. A. Edge, R. Anderson, D. Jervis, D. C. McKay, R. Day, S. Trotzky, J. H. Thywissen, *Imaging and addressing of individual fermionic atoms in an optical lattice*, *Phys. Rev. A* **92**, 063406 (2015).

- [24] E. Haller, J. Hudson, A. Kelly, D. A. Cotta, B. Peaudecerf, G. D. Bruce, S. Kuhr, *Single-atom imaging of fermions in a quantum-gas microscope*, Nature Physics **11**, 738 (2015).
- [25] L. W. Cheuk, M. A. Nichols, M. Okan, T. Gersdorf, V. V. Ramasesh, W. S. Bakr, T. Lompe, M. W. Zwierlein, *Quantum-Gas Microscope for Fermionic Atoms*, Phys. Rev. Lett. **114**, 193001 (2015).
- [26] L. W. Cheuk, M. A. Nichols, K. R. Lawrence, M. Okan, H. Zhang, M. W. Zwierlein, *Observation of 2D Fermionic Mott Insulators of 40K with Single-Site Resolution*, Phys. Rev. Lett. **116**, 235301 (2016).
- [27] L. W. Cheuk, M. A. Nichols, K. R. Lawrence, M. Okan, H. Zhang, E. Khatami, N. Trivedi, T. Paiva, M. Rigol, M. W. Zwierlein, *Observation of spatial charge and spin correlations in the 2D Fermi-Hubbard model*, Science **353**, 1260 (2016).
- [28] T. Busch, B. G. Englert, K. Rzȃzewski, M. Wilkens, *Two Cold Atoms in a Harmonic Trap*, Found. Phys. **28**, 549 (1998).
- [29] X. Liu, H. Hu, P. D. Drummond, *Three attractively interacting fermions in a harmonic trap: Exact solution, ferromagnetism, and high-temperature thermodynamics*, Phys. Rev. A **82**, 023619 (2010).
- [30] J. P. Kestner, L.-M. Duan, *Level crossing in the three-body problem for strongly interacting fermions in a harmonic trap*, Phys. Rev. A **76**, 033611 (2007).
- [31] F. Werner, Y. Castin, *Unitary Quantum Three-Body Problem in a Harmonic Trap*, Phys. Rev. Lett. **97**, 150401 (2006).
- [32] N. J. S. Loft, A. S. Dehkharghani, N. P. Mehta, A. G. Volosniev, N. T. Zinner, *A variational approach to repulsively interacting three-fermion systems in a one-dimensional harmonic trap*, EPJ D **69**, 65 (2015).
- [33] P. Kořcick, *Three strongly correlated charged bosons in a one-dimensional harmonic trap: natural orbital occupancies*, EPJ B **85**, 1 (2012).
- [34] P. Kořcick, *The von Neumann entanglement entropy for Wigner-crystal states in one dimensional N-particle systems*, Phys. Lett. A **379**, 293 (2015).
- [35] P. Kořcick, *Bipartite correlations in quantum resonance states*, Phys. Lett. A **380**, 1256 (2016).
- [36] M. Olshanii, S. G. Jackson, *An exactly solvable quantum four-body problem associated with the symmetries of an octacube*, New J. Phys. **17**, 105005 (2015).

- [37] N. L. Harshman, *One-Dimensional Traps, Two-Body Interactions, Few-Body Symmetries: I. One, Two, and Three Particles*, *Few-Body Syst.* **57**, 11 (2016).
- [38] N. L. Harshman, *One-Dimensional Traps, Two-Body Interactions, Few-Body Symmetries: II. N Particles*, *Few-Body Syst.* **57**, 45 (2016).
- [39] D. Blume K. M. Daily, *Breakdown of Universality for Unequal-Mass Fermi Gases with Infinite Scattering Length*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 170403 (2010).
- [40] J. Bjerlin, S. M. Reimann, G. M. Bruun, *Few-Body Precursor of the Higgs Mode in a Fermi Gas*, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 155302 (2016).
- [41] M. E. S. Andersen, A. S. Dehkharghani, A. G. Volosniev, E. J. Lindgren, N. T. Zinner, *An interpolatory ansatz for describing one-dimensional confined Fermi systems*, *Scientific Reports* **6**, 28362 (2016).
- [42] W. Ketterle, K. B. Davis, M. A. Joffe, A. Martin, D. E. Pritchard, *High densities of cold atoms in a dark spontaneous-force optical trap*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2253 (1993).
- [43] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, Z. Hadzibabic, *Bose-Einstein Condensation of Atoms in a Uniform Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 200406 (2013).
- [44] L. Tonks, *The Complete Equation of State of One, Two and Three-Dimensional Gases of Hard Elastic Spheres*, *Phys. Rev.* **50**, 955 (1936).
- [45] M. Girardeau, *Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension*, *J. Math. Phys.* **1**, 516 (1960).
- [46] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Tonks–Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice*, *Nature* **429**, 277 (2004).
- [47] T. Kinoshita, T. Wenger, D. S. Weiss, *Observation of a One-Dimensional Tonks-Girardeau Gas*, *Science* **305**, 1125 (2004).
- [48] M. Olshanii, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 938 (1998).
- [49] G. Breit P. R. Zilsel, *The Scattering of Slow Neutrons by Bound Protons. II. Harmonic Binding—Neutrons of Zero Energy*, *Phys. Rev.* **71**, 232 (1947).
- [50] K. Wódkiewicz, *Fermi pseudopotential in arbitrary dimensions*, *Phys. Rev. A* **43**, 68 (1991).

- [51] C. Chin, R. Grimm, P. S. Julienne, E. Tiesinga, *Feshbach resonances in ultracold gases*, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
- [52] E. Haller, M. Gustavsson, M. J. Mark, J. G. Danzl, R. Hart, G. Pupillo, H. C. Nägerl, *Realization of an Excited, Strongly Correlated Quantum Gas Phase*, Science **325**, 1224 (2009).
- [53] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, W. Ketterle, *Condensation of Pairs of Fermionic Atoms near a Feshbach Resonance*, Phys. Rev. Lett. **92**, 120403 (2004).
- [54] G. Thalhammer, K. Winkler, F. Lang, S. Schmid, R. Grimm, J. H. Denschlag, *Long-Lived Feshbach Molecules in a Three-Dimensional Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **96**, 050402 (2006).
- [55] E. Wille, F. M. Spiegelhalder, G. Kerner, D. Naik, A. Trenkwalder, G. Hendl, F. Schreck, R. Grimm, T. G. Tiecke, J. T. M. Walraven, S. J. J. M. F. Kokkelmans, E. Tiesinga, P. S. Julienne, *Exploring an Ultracold Fermi-Fermi Mixture: Interspecies Feshbach Resonances and Scattering Properties of 6 Li and 40 K*, Phys. Rev. Lett. **100**, 053201 (2008).
- [56] T. G. Tiecke, M. R. Goosen, A. Ludewig, S. D. Gensemer, S. Kraft, S. J. J. M. F. Kokkelmans, J. T. M. Walraven, *Broad Feshbach Resonance in the 6 Li- 40 K Mixture*, Phys. Rev. Lett. **104**, 053202 (2010).
- [57] C. Regal, M. Greiner, D. S. Jin, *Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs*, Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
- [58] D. Blume, *Viewpoint: Jumping from two and three particles to infinitely many.*, Physics **3**, 74 (2010).
- [59] D. Blume, *Few-body physics with ultracold atomic and molecular systems in traps*, Rep. Prog. Phys. **75**, 046401 (2012).
- [60] T. Grining, M. Tomza, M. Lesiuk, M. Przybytek, M. Musiał, R. Moszynski, M. Lewenstein, P. Massignan, *Crossover between few and many fermions in a harmonic trap*, Phys. Rev. A **92**, 061601(R) (2015).
- [61] R. Schmitz, S. Krönke, L. Cao, P. Schmelcher, *Quantum breathing dynamics of ultracold bosons in one-dimensional harmonic traps: Unraveling the pathway from few-to many-body systems.*, Phys.Rev.A **88**, 043601 (2013).
- [62] T. Sowiński, T. Grass, O. Dutta, M. Lewenstein, *Few interacting fermions in a one-dimensional harmonic trap*, Phys. Rev. A **88**, 033607 (2013).

- [63] S. E. Gharashi D. Blume, *Correlations of the Upper Branch of 1D Harmonically Trapped Two-Component Fermi Gases*, Phys. Rev. Lett. **111**, 045302 (2013).
- [64] D. Blume, *Small mass- and trap-imbalanced two-component Fermi systems*, Phys. Rev. A **78**, 013613 (2008).
- [65] K. Daily D. Blume, *Thermodynamics of the two-component Fermi gas with unequal masses at unitarity*, Phys. Rev. A **85**, 013609 (2012).
- [66] D. Roscher, J. Braun, J. E. Drut, *Inhomogeneous phases in one-dimensional mass- and spin-imbalanced Fermi gases*, Phys. Rev. A **89**, 063609 (2014).
- [67] A. S. Dehkharghani, A. G. Volosniev, N. T. Zinner, *Impenetrable mass-imbalanced particles in one-dimensional harmonic traps*, J. Phys. B **49**, 085301 (2016).
- [68] X. Cui T. L. Ho, *Phase Separation in Mixtures of Repulsive Fermi Gases Driven by Mass Difference*, Phys. Rev. Lett. **110**, 165302 (2013).
- [69] E. Lindgren, J. Rotureau, C. Forssén, A. Volosniev, N. T. Zinner, *Fermionization of two-component few-fermion systems in a one-dimensional harmonic trap*, New J. Phys. **16**, 063003 (2014).
- [70] W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky, W. H. Press, B. P. Flannery, *Numerical Recipes Example Book (FORTRAN)* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [71] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, 3rd ed. (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1999).
- [72] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, C. Yang, *Arpack Users Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems With Implicitly Restarted Arnoldi Methods* (Society for Industrial & Applied Mathematics, Philadelphia, 1998).
- [73] T. Sowiński, M. Gajda, K. Rzążewski, *Pairing in a system of a few attractive fermions in a harmonic trap*, Europhys. Lett. **109**, 26005 (2015).
- [74] T. Sowiński, *Slightly Imbalanced System of a Few Attractive Fermions in a One-Dimensional Harmonic Trap*, Few-Body Syst. **56**, 659 (2015).
- [75] J. Rotureau, *Interaction for the trapped fermi gas from a unitary transformation of the exact two-body spectrum*, European Physical Journal D **67**, 153 (2013).
- [76] M. Gajda, J. Mostowski, T. Sowiński, M. Załuska-Kotur, *Single-shot imaging of trapped Fermi gas*, Europhys. Lett. **115**, 20012 (2016).

- [77] M. A. García-March, B. Juliá-Díaz, G. E. Astrakharchik, J. Boronat, A. Polls, *Distinguishability, degeneracy, and correlations in three harmonically trapped bosons in one dimension*, Phys. Rev. A **90**, 063605 (2014).
- [78] D. H. Gloeckner R. D. Lawson, *Spurious center-of-mass motion*, Phys. Lett. B **53**, 313 (1974).
- [79] D. V. Fedorov, M. Mikkelsen, A. S. Jensen, N. T. Zinner, *Analytic Expression for Three-Body Recombination Rates into Deep Dimers*, Few-Body Syst. **56**, 889 (2015).
- [80] R. E. Barfknecht, A. S. Dehkharghani, A. Foerster, N. T. Zinner, *Correlations properties of a three-body bosonic mixture in a harmonic trap*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, 135301 (2016).
- [81] M. A. Załuska-Kotur, M. Gajda, A. Orłowski, J. Mostowski, *Soluble model of many interacting quantum particles in a trap*, Phys. Rev. A **61**, 033613 (2000).
- [82] J. G. Cosme, C. Weiss, J. Brand, *Center-of-mass motion as a sensitive convergence test for variational multimode quantum dynamics*, Phys. Rev. A **94**, 043603 (2016).
- [83] L. A. Williamson P. B. Blakie, *Dynamics of polar-core spin vortices in a ferromagnetic spin-1 Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. A **94**, 063615 (2016).
- [84] R. G. McDonald A. S. Bradley, *Brownian motion of a matter-wave bright soliton moving through a thermal cloud of distinct atoms*, Phys. Rev. A **93**, 063604 (2016).
- [85] A.-C. Voigt, M. Taglieber, L. Costa, T. Aoki, W. Wieser, T. W. Hänsch, K. Dieckmann, *Ultra-cold Heteronuclear Fermi-Fermi Molecules*, Phys. Rev. Lett. **102**, 020405 (2009).
- [86] I. Bialynicki-Birula, *Exact solutions of nonrelativistic classical and quantum field theory with harmonic forces*, Lett. Math. Phys. **10**, 189 (1985).
- [87] I. Bialynicki-Birula Z. Bialynicka-Birula, *Center-of-mass motion in the many-body theory of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **65**, 063606 (2002).
- [88] T. Sowiński, *Wave functions of linear systems*, Acta Phys. Polon. **38**, 2173 (2007).
- [89] M. Taglieber, A. C. Voigt, T. Aoki, T. W. Hänsch, K. Dieckmann, *Quantum Degenerate Two-Species Fermi-Fermi Mixture Coexisting with a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **100**, 010401 (2008).
- [90] M. Taglieber, A. C. Voigt, F. Henkel, S. Fray, T. W. Hänsch, K. Dieckmann, *Simultaneous magneto-optical trapping of three atomic species*, Phys. Rev. A **73**, 011402 (2006).

- [91] T. Sowiński, *Creation on Demand of Higher Orbital States in a Vibrating Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **108**, 165301 (2012).
- [92] S. Sala, P.-I. Schneider, A. Saenz, *Inelastic Confinement-Induced Resonances in Low-Dimensional Quantum Systems*, Phys. Rev. Lett. **109**, 073201 (2012).
- [93] S. Sala, G. Zürn, T. Lompe, A. N. Wenz, S. Murmann, F. Serwane, S. Jochim, A. Saenz, *Coherent Molecule Formation in Anharmonic Potentials Near Confinement-Induced Resonances*, Phys. Rev. Lett. **110**, 203202 (2013).
- [94] A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, M. Valiente, N. T. Zinner, *Strongly interacting confined quantum systems in one dimension*, Nature Comm. **5**, 5300 (2014).
- [95] N. J. S. Loft, A. S. Dekharghani, N. P. Mehta, A. G. Volosniev, N. T. Zinner, *A variational approach to repulsively interacting three-fermion systems in a one-dimensional harmonic trap*, EPJ D **69**, 65 (2015).
- [96] C. E. Berger, J. E. Drut, W. J. Porter, *Hard-wall and non-uniform lattice Monte Carlo approaches to one-dimensional Fermi gases in a harmonic trap*, Comput. Phys. Commun. **208**, 103 (2016).
- [97] F. Deuretzbacher, D. Becker, J. Bjerlin, S. M. Reimann, L. Santos, *Quantum magnetism without lattices in strongly interacting one-dimensional spinor gases*, Phys. Rev. A **90**, 013611 (2014).
- [98] T. Sowiński, R. W. Chhajlany, O. Dutta, L. Tagliacozzo, M. Lewenstein, *Criticality in the Bose-Hubbard model with three-body repulsion*, Phys. Rev. A **92**, 043615 (2015).
- [99] S.-J. Gu, H.-M. Kwok, W.-Q. Ning, H.-Q. Lin, *Fidelity susceptibility, scaling, and universality in quantum critical phenomena*, Phys. Rev. B **77**, 245109 (2008).
- [100] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).
- [101] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
- [102] M. A. García-March, B. Juliá-Díaz, G. E. Astrakharchik, T. Busch, J. Boronat, A. Polls, *Sharp crossover from composite fermionization to phase separation in microscopic mixtures of ultracold bosons*, Phys. Rev. A **88**, 063604 (2013).
- [103] M. D. Girardeau, M. Olshanii, *Theory of spinor Fermi and Bose gases in tight atom waveguides*, Phys. Rev. A **70**, 023608 (2004).

- [104] M. D. Girardeau A. Minguzzi, *Soluble Models of Strongly Interacting Ultracold Gas Mixtures in Tight Waveguides*, Phys. Rev. Lett. **99**, 230402 (2007).
- [105] H. Hu, L. Guan, S. Chen, *Strongly interacting Bose-Fermi mixtures in one dimension*, New Journal of Physics **18**, 025009 (2016).
- [106] F. Deuretzbacher, D. Becker, J. Bjerlin, S. M. Reimann, L. Santos, *Spin-chain model for strongly interacting one-dimensional Bose-Fermi mixtures*, Phys. Rev. A **95**, 043630 (2017).
- [107] A. S. Dehkharghani, F. F. Bellotti, N. T. Zinner, *Analytical and numerical studies of Bose-Fermi mixtures in a one-dimensional harmonic trap*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **50**, 144002 (2017).