

WYDZIAŁ PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI
POLITECHNIKA WROCŁAWSKA

BADANIA NAD KWANTOWYMI STANAMI
GAZÓW ATOMOWYCH PRZY UŻYCIU METODY
"DENSITY-MATRIX RENORMALIZATION GROUP"

MACIEJ MARCINIAK
NR INDEKSU: 226 489

Praca magisterska napisana
pod kierunkiem
dr. hab. Krzysztofa Pawłowskiego, prof. CFT



Politechnika
Wroclawska

WROCLAW 2021

Abstrakt

Badania ultrazimnych gazów atomowych są jedną z najintensywniej rozwijanych gałęzi fizyki. Najnowsze eksperymenty przeprowadzone dla atomów oddziałujących dipolowo doprowadziły do odkrycia nowych stanów materii – kropeł kwantowych. Niestety, najczęściej stosowane do opisu zdegenerowanych gazów kwantowych metody wywodzące się z przybliżenia średniego pola nie są w stanie udzielić odpowiedzi na wszystkie pytania o zjawiska w nich zachodzące, między innymi o korelacje międzyatomowe. Jedyną możliwością wyznaczenia tych istotnych charakterystyk jest przeprowadzenie rachunków *ab initio* w ramach teorii wielu ciał. W niniejszej pracy zastosowano metodę "Density matrix renormalization group" (DMRG) do zbadania układów atomów oddziałujących dipolowo umieszczonych w quasi-jednowymiarowej pułapce potencjału z okresowymi warunkami brzegowymi. Otrzymane wyniki pozwoliły wyznaczyć właściwe im funkcje korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$ i na tej podstawie stworzyć diagram fazowy z wyraźnie rozgraniczonymi fazą gazową oraz stanami związanymi.

Słowa kluczowe: ultrazimne gazy atomowe, oddziaływania dipolowe, DMRG

Abstract

The study of ultra-cold atomic gases is one of the most intensively developed areas of physics. Recent experiments performed for dipolar gases have led to the discovery of new states of matter – quantum droplets. Unfortunately, the most common methods of describing degenerate quantum gases, derived from the mean-field approximation, are not capable to address all questions about phenomena occurring in them, in particular the ones related to the quantum correlations. The only way to determine these important characteristics is to carry out the calculations *ab initio* in the framework of many-body theory. In this paper, the method of "Density matrix renormalization group" (DMRG) to study systems of dipolar atoms placed in a quasi-one-dimensional potential with periodic boundary conditions. The obtained results allowed us to determine their respective correlation function $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$ and on this basis to create a phase diagram with clearly separated gas phase and bound states.

Key words ultracold gases, dipolar interaction, DMRG

Oświadczenie kierującego pracą

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

Data

Podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora (autorów) pracy

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

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

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

Data

Podpis autora (autorów) pracy

Spis treści

1	Wstęp	9
1.1	Cel pracy	10
2	Układ fizyczny i jego hamiltonian	12
2.1	Przybliżenie jednomodowe	13
2.2	Hamiltonian w jednostkach bezwymiarowych	14
2.3	Hamiltonian w formalizmie drugiej kwantyzacji	15
2.4	Definicja funkcji korelacji	16
3	Przypadki graniczne	17
3.1	Cząstki swobodne	17
3.2	Gaz w reżimie Tonksa-Girardeau	17
3.3	Gaz bez oddziaływań dipolowych	18
3.4	Dwie cząstki oddziałujące dipolowo	20
4	Metody obliczeniowe	22
4.1	DMRG	23
4.1.1	iDMRG	23
4.1.2	Rozkład według wartości osobliwych	25
4.1.3	fDMRG	26
4.2	Baza obliczeniowa	27
4.3	Pełna postać hamiltonianu DMRG	28
4.4	Elementy macierzowe v_{dd}^{σ}	28
5	Testy zbieżności	30
5.1	Liczba węzłów i maksymalne obsadzenie	30
5.2	Maksymalny błąd odcięcia i maksymalna wielkość bazy	30
5.3	Porównanie z modelem ciągłym	31
6	Wyniki	35
6.1	Parametry obliczeń numerycznych	35
6.2	Diagramy fazowe	36
7	Wnioski i plany na przyszłość	38
8	Uzupełnienia	39
8.1	Korelacje w gazie Tonksa-Girardeau	39
8.2	Dyskretyzacja hamiltonianu	40
9	Bibliografia	43

Spis rysunków

1	Rysunek przedstawia atomy o stałym momencie dipolowym spolaryzowane w jednym kierunku silnym zewnętrznym polem magnetycznym. W zależności od kąta pomiędzy osią momentu magnetycznego a wzajemnym położeniem atomów (θ) oddziaływania mogą być przyciągające lub odpychające [1]. W niniejszej pracy rozważany jest przypadek oddziaływań przyciągających zaprezentowany na ilustracji (c).	13
2	Na rysunku zaprezentowano (a) funkcje korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ obliczone dla gazu Tonksa-Girardeu na podstawie równania (93) dla kilku przykładowych liczb atomów (N) oraz (b) oczekiwaną odległość pomiędzy atomami (λ) obliczoną dla modeli o różnych liczbach atomów (N).	18
3	Grafika prezentuje funkcje korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ obliczone dla modelu Lieba-Linigera składającego się z $N = 2$ atomów. Jak można zauważyć dla oddziaływań większych niż $g = 100$ układ wchodzi w reżim gazu Tonksa-Girardeu i wraz ze wzrostem siły oddziaływań funkcja korelacji nie zmienia znacząco swojego kształtu.	19
4	Rysunek przedstawia quasi-jednowymiarową sieć optyczną z pięcioma lokalnymi minimami potencjału. Uwięzione w niej bozony oddziałują ze sobą tylko jeśli znajdują się w tym samym węźle. Mają również możliwość tunelowania do sąsiednich węzłów, jednak nie mogą opuścić systemu jako całości [2].	22
5	Zachowanie atomów uwięzionych w sieci optycznej zaprezentowanych na rysunku 4 można opisać korzystając z uproszczonego modelu łańcucha składającego się z $M = 5$ węzłów. Tunelowanie atomów typowe dla modelu ciągłego odwzorowane jest poprzez całkę przeskoku J i może nastąpić jedynie do sąsiednich oczek. Oddziaływanie dwóch atomów w jednym oczku opisane jest przez potencjał U . W prezentowanym tu przypadku sztucznie ograniczono maksymalną liczbę atomów w węźle do $maxOcc = 3$, czyli w każdym oczku mogą znajdować się 0,1,2 lub 3 bozony. Ograniczenie to nie występuje w systemach rzeczywistych. Zabieg ten ma na celu jedynie ograniczenie wymiaru przestrzeni Hilberta i obniżenie stopnia złożoności ewentualnych obliczeń.	23

- 6 Rysunek przedstawia cztery podstawowe kroki algorytmu Infinite Size DMRG [3]. Cykl rozpoczyna się od przygotowania dwóch niezależnych bloków A oraz B o bazach stanów odpowiednio $\{|\alpha\rangle_A\}$ oraz $\{|\alpha\rangle_B\}$. Każda z baz ma wymiar nie większy niż D stanów. Bloki A oraz B są opisane hamiltonianami \hat{H}_A oraz \hat{H}_B , z których każdy działa wyłącznie na węzły własnego bloku. Pierwszym krokiem algorytmu jest dołączenie do łańcucha pary nowych węzłów w taki sposób, by znalazły się pomiędzy blokami A oraz B. Taka struktura nazywana jest superblokiem. Dowolny stan superbloku można wyrazić poprzez superpozycję stanów tworzących go podukładów, tak jak pokazano w (66). Hamiltonian opisujący superblok jest sumą hamiltonianów elementów składowych oraz oddziaływań pomiędzy nimi. Uwzględniając maksymalny zasięg oddziaływania równy jednemu oczku, tj. najprostszej sytuacji: $\hat{H}_{A\bullet\bullet B} = \hat{H}_A + \hat{H}_a + \hat{H}_b + \hat{H}_B + \hat{H}_{A\bullet} + \hat{H}_{\bullet B} + \hat{H}_{\bullet\bullet}$, gdzie hamiltoniany \hat{H}_A oraz \hat{H}_B opisują bloki A oraz B, a operatory \hat{H}_a oraz \hat{H}_b opisują pojedyncze oczka, tutaj odpowiednio węzeł sąsiadujący z blokiem A oraz węzeł sąsiadujący z blokiem B. Kolejne człony hamiltonianu wprowadzają oddziaływania pomiędzy elementami łańcucha – $\hat{H}_{A\bullet}$ pomiędzy blokiem A oraz sąsiadującym z nim węzłem, $\hat{H}_{\bullet\bullet}$ pomiędzy środkowymi węzłami oraz $\hat{H}_{\bullet B}$ pomiędzy blokiem B a sąsiadującym z nim węzłem. W kolejnym kroku hamiltonian $\hat{H}_{A\bullet\bullet B}$ jest diagonalizowany, a na podstawie jego stanu podstawowego tworzona jest macierz gęstości superbloku. Następnie dzięki skorzystaniu ze śladu częściowego macierz ta podlega separacji na podukłady opisywane macierzami gęstości $\hat{\rho}_A$ oraz $\hat{\rho}_B$ (67). Po tym etapie łańcuch ponownie jest rozseparowany na dwa niezależne bloki A oraz B. 24
- 7 Wizualizacja rozkładu macierzy M oraz M' według wartości osobliwych. Dowolna macierz M może zostać zapisana jako iloczyn macierzy U , S oraz V^\dagger . Zastępując część najmniejszych co do modułu elementów macierzy S zerami można uzyskać macierz M' w optymalny sposób odwzorowującą macierz M dla ograniczonej liczby stanów rozpinającej ją bazy, czyli minimalizującą wyrażenie $\|M - M'\|_F^2$ 25
- 8 Na rysunku zaprezentowano cykl przebiegów (ang. sweeps) procesu fDMRG [4]. 26
- 9 Baza stanów jednoatomowych $\theta(\tilde{x})$ 27
- 10 Powyższe grafiki przedstawiają potencjał ciągły $v_{\text{dd}}^\sigma(\tilde{x})$ obliczony dla $\sigma = 0.005$ (oznaczony czerwoną linią). Niebieskie słupki to wartości elementów macierzowych $v_0^\sigma, v_1^\sigma, v_2^\sigma$ oraz v_3^σ . Wykresy ilustrują współczynniki obliczone dla długości łańcucha równej (a) $M = 32$, (b) $M = 72$, (c) $M = 96$ oraz (d) $M = 240$ węzłów. 29
- 11 Na rysunku zaprezentowano zależności energii stanu podstawowego wyznaczone dla łańcuchów o różnych liczbach węzłów. Obliczenia prowadzono dla $N = 32$ atomów, maksymalnego poziomu obsadzeń $\text{maxOcc} = 5$ oraz maksymalnego błędu odcięcia $\epsilon = 10^{-8}$. Szarą linią oznaczono obliczoną analitycznie energię modelu Lieb-Linigera o odpowiednich parametrach. W przypadku gdy oddziaływania między cząstkami są słabe ($g = 10$) nawet dla krótkich łańcuchów wyniki numeryczne niemal pokrywają się z analitycznymi. Gdy oddziaływania stają się silniejsze ($g = 1000$) zachowaniem precyzji wymaga znacznie dłuższych łańcuchów. W dalszej części pracy obliczenia prowadzone są dla $M = 96$ węzłów, co jest dobrym kompromisem pomiędzy precyzją a kosztem obliczeń. 31

12	Na rysunku zaprezentowano zależność energii stanu podstawowego wyznaczone metodą DMRG dla różnych maksymalnych poziomów obsadzeń węzła (<i>maxOcc</i>). Jak można zauważyć w przypadku słabych oddziaływań energia bardzo silnie zależy od maksymalnej liczby cząstek, które mogą znaleźć się w jednym punkcie. Do uzyskania pełnej zbieżności konieczne jest stosowanie dużych baz obliczeniowych pozwalających na jednoczesne obsadzenie węzła nawet przez pięć bozonów. Gdy oddziaływania kontaktowe stają się silniejsze układ wchodzi w reżim bliski przypadkowi gazu Tonksa-Girardeu. Obsadzenie tego samego węzła już przez trzy atomy jednocześnie jest niemal zerowe. Obliczenia przeprowadzono dla $N = 32$ atomów na łańcuchu o długości $M = 96$ przy maksymalnym błędzie odcięcia $\epsilon = 10^{-8}$. Oddziaływania dipolowe oraz zewnętrzny potencjał harmoniczny zostały wyłączone ($g_{dd} = g_{\omega} = 0$).	32
13	Na rysunku zestawione zostały ze sobą energia stanu podstawowego modelu Lieba-Linigera 3.3 obliczona analitycznie (szare linie) z energią stanu podstawowego obliczonego metodą DMRG.	32
14	Na powyższej grafice prezentowane jest zestawienie funkcji korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ wyznaczonych dla modelu Lieba-Linigera oraz wyników obliczeń DMRG. Rachunki przeprowadzone zostały dla parametrów $M = 96$, $\epsilon = 10^{-8}$. Ilustracje przedstawiają wyniki dla (a) $g = 10$, (b) $g = 100$, (c) $g = 1000$ oraz (d) $g = 10000$	33
15	Na grafice przedstawiono zestawienie funkcji korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ wyznaczonych dla modelu dwuatomowego opisanego w rozdziale 3.4 (szare linie) oraz wyników obliczeń DMRG (niebieskie linie). Obliczenia przeprowadzono dla $M = 96$, $\epsilon = 10^{-8}$ oraz $g = 1000$. Grafiki ilustrują wyniki uzyskane dla (a) $f_{dd} = 0.1$, (b) $f_{dd} = 0.3$, (c) $f_{dd} = 0.33$ oraz (d) $f_{dd} = 0.4$, gdzie $f_{dd} = g_{dd}/g$.	34
16	Na wykresie prezentowana jest wartość parametru λ dla układu złożonego z $N = 8$ atomów. Po lewej znajduje się pełny diagram fazowy przedstawiający oczekiwaną odległość między atomami, wyznaczaną korzystając z metody DMRG. Po prawej znajdują się przekroje wykonane dla linii $g = 50, 500$ oraz 5000 . Widać na nich skokową zmianę oczekiwanych odległości świadcząca o istnieniu przejścia fazowego.	36
17	Na wykresach prezentowana jest wartość parametru λ wyznaczona dla różnych zestawów parametrów g oraz f_{dd} . Ilustracje przedstawiają wyniki dla (od lewej) $N = 2$ oraz $N = 16$ atomów.	36
18	Na wykresach prezentowana jest wartość parametru λ wyznaczona dla różnych zestawów parametrów g oraz f_{dd} . Ilustracje przedstawiają wyniki dla (od lewej) $N = 24$ oraz $N = 32$ atomów.	37
19	Na wykresie zaznaczone zostały punkty, w których długość λ przekracza umowną granicę pomiędzy gazem a stanami związanymi interpretowaną tu jako przejście fazowe. Zostały tu zebrane wyniki obliczone dla różnych liczb atomów. Jak można zauważyć, linia zmiany fazy praktycznie nie zależy od liczby atomów tworzących układ. Kolorem żółtym oznaczono zasięg występowania typowej fazy gazowej w której cząstki rozmieszczone są w maksymalnych odległościach od siebie nawzajem. Kolor niebieski to strefa formowania się stanów związanych takich jak krople kwantowe i solitony.	37

1 Wstęp

Badania nad zdegenerowanymi gazami kwantowymi stały się w ostatnich latach jedną z najintensywniej rozwijanych gałęzi fizyki. Dzieje się tak, gdyż eksperymenty przeprowadzane na ultrazimnych atomach, schłodzonych do temperatur rzędu 100nK, oferują badaczom dostęp do fundamentów mechaniki kwantowej na nieosiągalną nigdzie indziej skalę. Jest to związane z możliwością kontrolowania w takich układach niezależnie wielu parametrów – gęstości, geometrii układu, a nawet potencjału oddziaływania między atomami. W szczególności możliwe jest modyfikowanie potencjału wiążącego atomy, od typowych pułapek o kształcie paraboloidy, po potencjały podobne do tych jakie wytwarzają jony tworzące sieć krystaliczną. Potencjały takie wytwarza się interferując wiązki laserowe o tak dobranych częstościach, aby siły dipolowe więziły atomy w strzałkach lub węzłach tak powstałej sieci optycznej. Badane są zarówno układy odwzorowujące modele Heisenberga [5] jak i Hubbarda [6], kluczowe dla badań nad magnetyzmem, modele fermionowe [6] symulujące nadprzewodnictwo czy typowe dla tej dziedziny duże pułapki, w których uwieziona jest cała chmura gazu funkcjonującego według reguł modeli ciągłych [7].

Rozwój tej dziedziny nauki nierozzerwalnie wiąże się z techniką laserową [8]. Pierwsze lasery powstały ponad pół wieku temu i gdy tylko technologia stała się dostatecznie stabilna, zaczęły być wykorzystywane do eksperymentów na rozrzedzonych gazach. Pozwoliło to w 1985 roku zademonstrować nową metodę laserowego chłodzenia atomów [9]. Trzy lata później, w 1988 roku opisano pierwsze działające pułapki magnetoptyczne [10, 11]. Stworzone zostały tym samym podwaliny pod rozwój technologii zimnych atomów, takich jakimi znamy je obecnie.

Pierwszy przełom w świecie nauki, który zawdzięczamy eksperymentom na zimnych atomach miał miejsce w 1995 roku. Wtedy po raz pierwszy udało się doprowadzić do kondensacji Bosego-Einsteina rozrzedzonego gazu atomów rubidu [12]. Autorzy projektu ubiegli tym samym o zaledwie kilka miesięcy grupę z MIT i ich eksperyment, który również zakończył się uzyskaniem kondensatu. W odróżnieniu od poprzedników - tym razem atomów sodu [13].

Problemy, z którymi przyszło mierzyć się badaczom przez długi czas wydawały się zaporowe. Poza samym stworzeniem pułapki magnetoptycznej należy również rozrzedzić chmurę gazu do około 10^{14} atomów na centymetr sześcienny [14]. Tak restrykcyjne ograniczenia są spowodowane naturalną dla atomów tendencją do tworzenia molekuł. Zasady zachowania energii i pędu praktycznie uniemożliwiają tworzenie molekuł podczas zderzeń dwóch wolnych atomów. Wynika to z dużej co do wartości bezwzględnej energii wiązania molekuły. Tworzenie się molekuł, będące zaczątkiem przechodzenia układu z fazy gazowej w stałą, wymaga zderzeń trójciałowych. Celem eksperymentatorów jest zatem stworzenie na tyle rozrzedzonego gazu, by prawdopodobieństwo zderzenia się trzech atomów stało się niemal zerowe. W praktyce, aby doprowadzić do kondensacji dla atomów większości pierwiastków w tak rozrzedzonym gazie konieczne jest uzyskanie temperatury rzędu kilkuset nanokelwinów.

Opis teoretyczny zdegenerowanych gazów kwantowych jest zadaniem skomplikowanym. Najpowszechniej stosowanym podejściem są rozmaite adaptacje teorii średniego pola (ang. Mean Field Theory, MF), prowadzące do równania Grossa-Pitajewskiego [15], w którym zakłada się, że dla dostatecznie dużych zbiorów słabo oddziałujących atomów efekty kwantowe będą mieć znikomy wpływ na zachowanie kondensatu.

Równanie Grossa-Pitajewskiego daje doskonałe, zgodne z eksperymentem wyniki. Pozwoliło przewidzieć takie nieoczekiwane zjawiska nieliniowe jak wzbudzenia solitonowe, potwierdzone później eksperymentalnie [16, 17].

Początkowo rozważania teoretyczne dotyczyły najprostszyc przypadków, czyli atomów oddziałujących wyłącznie na bardzo małych odległościach [18, 19]. Dla zimnych, powolnych atomów oddziaływania van der Waalsa mogą być traktowane jak oddziaływania kontaktowe. Poza łatwością opisu i obliczeń oddziaływania krótkozasięgowe mają jeszcze dwie wielkie zalety.

- Jeden z niewielu rozwiązywalnych analitycznie kwantowych modeli wielociałowych – model Lieba-

Linigera – opisuje właśnie jednowymiarowy układ z okresowymi warunkami brzegowymi (ang. Periodic Boundary Condition, PBC) pozwalając wyznaczyć energię oraz relację dyspersji układu składającego się z nawet kilkuset cząstek [18].

- Naukowcy zajmujący się fizyką eksperymentalną są w stanie regulować siły międzyatomowych oddziaływań kontaktowych. Najczęściej wykorzystuje się do tego zjawisko rezonansu Feshbacha [20].

Od kilkunastu lat podejmowane są badania nad atomami pierwiastków o niezerowych momentach magnetycznych [21] takich jak chrom ^{52}Cr [22], dysproz ^{162}Dy [23] oraz erb ^{168}Er [24]. Oddziaływanie między momentami magnetycznymi jest dalekozasięgowe, a jego znak (przyciąganie bądź odpychanie) zależy od ich wzajemnej orientacji. W eksperymentach momenty magnetyczne atomów są zwykle spolaryzowane w jednym kierunku poprzez zewnętrzne pole magnetyczne. Poza dwoma skrajnymi, dobrze znanymi nauce przypadkami - dominacją oddziaływań odpychających prowadzącą do powstania gazu oraz dominacją sił przyciągających powodującą zapadanie się chmury atomów - istnieją również reżimy, w których oba typy oddziaływań będą się wzajemnie niemal równoważyć [25, 26, 24]. Nieoczekiwane w takim reżimie zaobserwowane zostały krople kwantowe (ang. Quantum Droplets) [26, 27]. Są to wielociałowe struktury powstające w momencie gdy międzyatomowe oddziaływania przyciągające, odpychające oraz fluktuacje wynikające z efektów kwantowych wzajemnie się równoważą. Charakteryzują się one stałą gęstością tworzącego je gazu oraz wyraźnie zarysowanymi granicami [25, 28]. Jeśli do kropli zostanie dołączony nowy atom wzrośnie jej przestrzenna wielkość, natomiast gęstość w jej wnętrzu pozostanie stała. Jest to właściwość odróżniająca kroplę kwantową od jasnego solitonu, który po dołączeniu do niego nowej cząstki zwiększy swoją gęstość.

Podczas eksperymentów przeprowadzanych na ultrazimnych atomach dysprozu [26] oraz erbu [29] zaobserwowano występowanie lokalnych zagęszczeń kondensatu, stanów związanych które przez kilka milisekund opierały się termalizacji. Zostało to uznane za pierwszą obserwację kropli kwantowej i poruszyło część środowiska naukowego. Podczas pięciu ostatnich lat powstało wiele publikacji wyjaśniających genezę powstawania kropli kwantowych oraz opisujących ich główne właściwości [28]. Większość opracowań opiera się o metody pola średniego, które nie pozwalają na udzielenie odpowiedzi na wiele istotnych pytań dotyczących korelacji pomiędzy atomami w kropli kwantowej. Pomimo znacznych nakładów pracy są to obiekty, o których ciągle jeszcze niewiele wiadomo.

Metody powstałe na gruncie teorii średniego pola opisujące zachowanie kondensatu stają się niewystarczające z jeszcze jednego powodu. Najnowsze eksperymenty często operują na bardzo małych liczbach atomów. W pracy [7] na pojedynczą wnękę potencjału przypada zaledwie pomiędzy 20 a 30 atomów dysprozu. Tak mała ich ilość zaczyna niebezpiecznie wykraczać poza zakres stosowalności teorii pola średniego.

Rozwiązaniem przedstawionych powyżej trudności może okazać się użycie metody analizy ultrazimnych gazów atomowych korzystającej z innych przybliżeń. Jednym z kandydatów do tej roli jest technika Renormalizacji Macierzy Gęstości, powszechniej znana pod swoją angielską nazwą jako Density Matrix Renormalization Group (DMRG). Pozwala ona w sposób przybliżony wyznaczyć stan podstawowy układu metodami rachunku wielociałowego [4, 30]. Dzięki temu możliwe staje się wyznaczenie korelacji międzyatomowych i analiza systemów zbudowanych z bardzo małej liczby atomów. Podstawowym problemem, który należy rozwiązać jest fakt, że metoda DMRG jest dedykowana obliczeniom w modelach dyskretnych (takich jak na przykład model Heisenberga). Wykorzystanie jej do analizy modeli ciągłych wymaga przeprowadzenia złożonej transformacji w taki sposób, by nie zmienić "fizyki" badanego układu.

1.1 Cel pracy

W niniejszej pracy zbadam metodą DMRG układ oddziałujących dipolowo atomów umieszczonych w quasi-jednowymiarowej pułapce potencjału z okresowymi warunkami brzegowymi. Celem projektu jest wyznaczenie punktu przejścia pomiędzy gazem a stanami związanymi oraz sprawdzenie czy jego położenie zmienia się dla różnych gęstości gazu. Na tej podstawie sporządzony zostanie diagram fazowy mogący w przyszłości

posłużyć do porównania rezultatów z innymi metodami obliczeniowymi oraz stanowić będzie punkt wyjściowy dla poszukiwań kropeł kwantowych metodami wielociałowymi.

2 Układ fizyczny i jego hamiltonian

Praca dotyczy bardzo rozrzedzonych gazów, w których istotne są oddziaływania zachodzące jedynie pomiędzy parami atomów, tzn. oddziaływania dwuciałowe. Rozważane będą przypadki dwóch typów oddziaływań – krótkozasięgowych (oddziaływania van der Waalsa) oraz nielokalnych (oddziaływania dipolowe). W eksperymentach gaz utrzymywany jest przez zewnętrzne potencjały pułapkujące – najczęściej są to różnego typu pułapki magneto-optyczne. Wszystkie te efekty dają wkład do energii, wyrażonej następującym hamiltonianem:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \hat{H}_{\text{vdW}} + \hat{H}_{\text{dd}} + \hat{H}_{\text{zew}}, \quad (1)$$

gdzie \hat{H}_{kin} , \hat{H}_{vdW} , \hat{H}_{dd} oraz \hat{H}_{zew} oznaczają odpowiednio człon kinetyczny, człon opisujący oddziaływania van der Waalsa (*vdW*), człon opisujący oddziaływania dipolowe oraz człon pochodzący od potencjału pułapkującego. Człon kinetyczny gazu złożonego z N identycznych atomów o masie m ma postać:

$$\hat{H}_{\text{kin}} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2, \quad (2)$$

gdzie sumowanie odbywa się po indeksach j kolejnych cząstek. Na oddziaływania przedstawione jako siły van der Waalsa składa się wiele różnych zjawisk fizycznych zachodzących w niewielkiej odległości od cząstki. Praca dotyczy ultrazimnych gazów, schłodzonych do temperatur rzędu setek nanokelwinów. Stosując teorię rozpraszania można pokazać, że w tym przypadku z dobrym przybliżeniem oddziaływanie van der Waalsa można zastąpić oddziaływaniem typu delta [8]

$$U_{\text{vdW}}(\mathbf{R}) \approx \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\mathbf{R}), \quad (3)$$

gdzie a_s to długość rozpraszania, a $\mathbf{R} = (x, y, z)$ oznacza tutaj różnicę położenia oddziałujących cząstek. Uwzględniając je w hamiltonianie modelu należy wprowadzić człon postaci:

$$\hat{H}_{\text{vdW}} = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \sum_{j>j'}^N \delta(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}), \quad (4)$$

w którym \mathbf{R}_j to położenie j -tego atomu względem środka pułapki magneto-optycznej, a sumowanie odbywa się po wszystkich parach cząstek. Oddziaływania dipolowe wynikające ze stałego momentu magnetycznego atomów charakteryzują się większym zasięgiem. Zależą od odległości pomiędzy dipolami, ich dipolowych momentów magnetycznych (μ) oraz orientacji (\mathbf{e}_1 i \mathbf{e}_2 to wektory jednostkowe, wzdłuż których zorientowane są momenty dipolowe atomów) jak [21]:

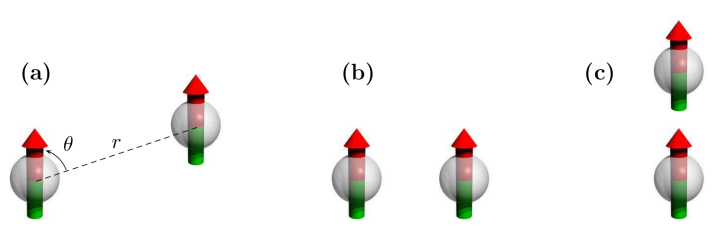
$$U_{\text{dd}}(\mathbf{R}) = \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \frac{(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)R^2 - 3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5}. \quad (5)$$

W przypadku, gdy magnetyczne momenty dipolowe atomów są spolaryzowane w jednym kierunku przez silne zewnętrzne pole magnetyczne wyrażenie to upraszcza się do [1]:

$$U_{\text{dd}}(\mathbf{R}) = \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2\theta}{R^3}, \quad (6)$$

gdzie kąt θ jest rozpięty pomiędzy kierunkiem orientacji dipoli, a prostą łączącą dwa atomy, tak jak to pokazano na rysunku 1. Jeśli kierunek polaryzacji jest zgodny z osią x wyrażenie przyjmuje finalną postać:

$$U_{\text{dd}}(\mathbf{R}) = \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \frac{1 - 3\frac{x^2}{R^2}}{R^3} = \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \frac{R^2 - 3x^2}{R^5}. \quad (7)$$



Rysunek 1: Rysunek przedstawia atomy o stałym momencie dipolowym spolaryzowane w jednym kierunku silnym zewnętrznym polem magnetycznym. W zależności od kąta pomiędzy osią momentu magnetycznego a wzajemnym położeniem atomów (θ) oddziaływania mogą być przyciągające lub odpychające [1]. W niniejszej pracy rozważany jest przypadek oddziaływań przyciągających zaprezentowany na ilustracji (c).

Pełna postać zależnego od nich członu hamiltonianu to:

$$\hat{H}_{\text{dd}} = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \sum_{j>j'}^N \frac{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})^2 - 3(x_j - x_{j'})^2}{(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})^5}. \quad (8)$$

Zewnętrzny potencjał harmoniczny pułapkujący atomy wyrażony jest wzorem

$$\hat{H}_{\text{zew}} = \frac{1}{2} m \sum_j^N (\omega_x^2 x_j^2 + \omega_y^2 y_j^2 + \omega_z^2 z_j^2), \quad (9)$$

gdzie $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ to częstotliwości oscylatora w kierunkach x, y oraz z . W niniejszej pracy skupiono się na przypadku, w którym kształt chmury atomów jest wydłużony w kierunku x i symetryczny w osi doń prostopadłej. Sytuacja taka ma miejsce, gdy częstotliwości pułapki spełniają relację $\omega_{\perp} = \omega_y = \omega_z \gg \omega_x$. Po wykonaniu podstawienia $r^2 := y^2 + z^2$, $\mathbf{r} = (y, z)$ człon hamiltonianu opisany równaniem (9) przyjmuje postać:

$$\hat{H}_{\text{zew}} = \frac{m}{2} \sum_j^N (\omega_x^2 x_j^2 + \omega_{\perp}^2 r_j^2). \quad (10)$$

2.1 Przybliżenie jednomodowe

Hamiltonian wprowadzony w poprzednim rozdziale jest trudny do analizy. Model można uprościć korzystając z faktu, że w kierunkach prostopadłych do osi x człon harmoniczny odgrywa dominującą rolę. Pozwala to wykonać przybliżenie, w którym funkcja falowa sprowadza się do postaci [31]:

$$\Psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) \approx \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \prod_{j=1}^N \Phi_0(\mathbf{r}_j), \quad (11)$$

gdzie x_1, x_2, \dots, x_N to rzuty położenia kolejnych cząstek na oś x . Współczynniki \mathbf{r}_j to rzuty położenia j -tej cząstki na płaszczyznę (y, z) . Funkcja $\Phi_0(\mathbf{r})$ zdefiniowana jest jako najniższy stan własny kwantowego oscylatora harmonicznego

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi} l_{\perp}} \exp\left(-\frac{r^2}{2l_{\perp}^2}\right), \quad (12)$$

gdzie $l_{\perp} = \sqrt{\hbar/(m\omega_{\perp})}$ może być utożsamiane z poprzeczną szerokością chmury gazu atomowego. Aproksymacja (11) nosi nazwę przybliżenia jednomodowego (ang. Single Mode Approximation, SMA). Pozwala ona

przeprowadzić całkowanie hamiltonianu w kierunkach y oraz z tak, by otrzymać układ quasi-jednowymiarowy:

$$\hat{H}(x_1, \dots, x_N) = \int_0^{+\infty} dr_1 dr_2 \dots dr_N \prod_{j=1}^N \Phi_0^*(\mathbf{r}_j) \hat{H}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \prod_{j'=1}^N \Phi_0(\mathbf{r}_{j'}). \quad (13)$$

Człony hamiltonianu opisujące energię kinetyczną oraz oddziaływania z potencjałem zewnętrznym po przeprowadzeniu opisanej powyżej transformacji przyjmują, z dokładnością do stałego przesunięcia energii, postać:

$$\hat{H}_{zew} = \hat{H}_{zew}^{1D} = \frac{1}{2} m \omega_x^2 \sum_j x_j^2, \quad (14)$$

oraz

$$\hat{H}_{kin} = \hat{H}_{kin}^{1D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \partial_{x_j}^2. \quad (15)$$

W przypadku oddziaływań krótkozasięgowych otrzymuje się postać oddziaływania jednowymiarowego w postaci zbliżonej do poprzedniej

$$U_{vdW}^{1D}(x) = \frac{\hbar^2 a_s}{m l_{\perp}^2} \delta(x). \quad (16)$$

Najtrudniejszą częścią jest uzyskanie jednowymiarowego potencjału dipolowego. Poniżej przytoczono wynik przedstawiony m. in. w pracy [28]:

$$U_{dd}(x) = \frac{\mu_0 \mu^2}{2\pi l_{\perp}^2} \frac{v_{dd}(x/l_{\perp})}{l_{\perp}}, \quad (17)$$

gdzie $v_{dd}(u) = \frac{1}{4} \left(2|u| - \sqrt{2\pi} (1+u^2) e^{u^2/2} \operatorname{erfc}(|u|/\sqrt{2}) \right)$. Powyższa funkcja jest zdefiniowana tak, aby zachodziła relacja $\int dx \delta(x) = \int du v_{dd}(u) = 1$. Ostatecznie hamiltonian redukuje się do postaci:

$$\hat{H}(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \partial_{x_j}^2 + \frac{\hbar^2 a_s}{m l_{\perp}^2} \sum_{j>j'} \delta(x_j - x_{j'}) - \frac{\mu_0 \mu^2}{2\pi l_{\perp}^3} \sum_{j>j'} v_{dd} \left(\frac{x_j - x_{j'}}{l_{\perp}} \right) + \frac{m \omega_x^2}{2} \sum_j x_j^2. \quad (18)$$

Tematem badań prowadzonych w niniejszej pracy są zjawiska wynikające ze wzajemnych oddziaływań pomiędzy atomami. W celu ograniczenia wpływu zewnętrznego potencjału na wyniki dalsze rozważania prowadzone będą dla modelu cząstek w jednowymiarowym pudle o długości L z periodycznymi warunkami brzegowymi i przy założeniu bardzo niskich częstości pułapki wzdłuż osi x Zgodnie z założeniem o periodyczności ograniczona została dziedzina położeń do $x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$.

2.2 Hamiltonian w jednostkach bezwymiarowych

Ważnym krokiem ułatwiającym późniejszą analizę jest przepisanie hamiltonianu do postaci bezwymiarowej. Bezwymiarowe położenia i energie zdefiniowane będą jako $\tilde{x} := x/L$, $\tilde{x} \in [-0.5, 0.5]$ oraz $\tilde{E} := E/(\hbar^2/mL^2)$. Zaczynając od podstawienia $\tilde{x} = x/L$ oraz $l_{\perp} = \sigma L$:

$$\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \sum_j \partial_{\tilde{x}_j}^2 + \frac{\hbar^2 a_s}{m \sigma^2 L^3} \sum_{j>j'} \delta(\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}) - \frac{\mu_0 \mu^2}{2\pi \sigma^3 L^3} \sum_{j>j'} v_{dd} \left(\frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}}{\sigma} \right) + \frac{m \omega_x^2 L^2}{2} \sum_j \tilde{x}_j^2 \quad (19)$$

i kontynuując transformację dla jednostek energii, otrzymuje się wzór na operator energii $\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}})$ w postaci bezwymiarowej

$$\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{1}{2} \sum_j \partial_{\tilde{x}_j}^2 + \frac{a_s}{\sigma^2 L} \sum_{j>j'} \delta(\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}) - \frac{m \mu_0 \mu^2}{2 \hbar^2 \pi \sigma^3 L} \sum_{j>j'} v_{dd} \left(\frac{\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}}{\sigma} \right) + \frac{m^2 \omega_x^2 L^4}{2 \hbar^2} \sum_j \tilde{x}_j^2. \quad (20)$$

W celu zachowania zgodności z formalizmem użytym w pracy [28] wprowadzone zostały oznaczenia $g := a_s/\sigma^2 L$, $g_{dd} := m\mu_0\mu^2/2\pi\sigma^2 L\hbar^2$ oraz $v_{dd}^\sigma(y) := v_{dd}(y/\sigma)/\sigma$. W dalszych rozdziałach niniejszej pracy pojawiać się będzie współczynnik $f_{dd} := g_{dd}/g$. Po wykonaniu tego podstawienia hamiltonian uzyskuje swoją ostateczną postać:

$$\tilde{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{1}{2} \sum_j^N \partial_{\tilde{x}_j}^2 + g \sum_{j>j'}^N \delta(\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}) - g_{dd} \sum_{j>j'}^N v_{dd}^\sigma(\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}) + g_\omega \sum_j^N \tilde{x}_j^2, \quad (21)$$

gdzie wprowadzono oznaczenie $g_\omega = \frac{m^2\omega^2 L^4}{2\hbar^2}$.

2.3 Hamiltonian w formalizmie drugiej kwantyzacji

Hamiltonian (21) wyraża energię układu w formalizmie wielocząstkowych funkcji falowych. Warto zauważyć, że zamiana indeksów dwóch dowolnych cząstek w modelu nie zmieni operatora energii. Oznacza to, że komutuje on z operatorem permutacji \hat{P} . Pozwala to na zapisanie stanów własnych hamiltonianu w bazie stanów własnych operatora permutacji. Implikacje są poważne - możliwe jest przepisanie problemu do bazy stanów Focka. W tej bazie stan $|\mathbf{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$ opisuje stan, w którym n_1 cząstek obsadza stan $|\varphi_1\rangle$, n_2 cząstek obsadza stan $|\varphi_2\rangle$ itd., dla dowolnie wybranej zupełnej, ortonormalnej bazy jednoatomowej $\{|\varphi_i\rangle\}$.

Stany Focka opisują ile cząstek obsadza zadany stan bez wskazywania, które to cząstki. W dalszych rozważaniach będą używane bozonowe operatory kreacji (\hat{b}^\dagger) i anihilacji (\hat{b}) o własnościach:

$$\hat{b}_i |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |\dots, n_i - 1, \dots\rangle, \quad (22)$$

$$\hat{b}_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle. \quad (23)$$

Muszą one gwarantować symetryczność funkcji falowej przy zamianie cząstek, czyli realizować bozonowe reguły komutacji $[\hat{b}_i, \hat{b}_{i'}^\dagger] = \delta_{i,i'}$, $[\hat{b}_i, \hat{b}_{i'}] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_{i'}^\dagger] = 0$. Korzystając z nich możliwe jest zapisanie stanu $|\mathbf{n}\rangle$ jako:

$$|\mathbf{n}\rangle = \left(\prod_{i=0}^{\infty} \frac{(\hat{b}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} \right) |\mathbf{0}\rangle, \quad (24)$$

gdzie $|\mathbf{0}\rangle = |0, 0, 0, \dots\rangle$ jest stanem próżni. Hamiltonian zapisany w tej bazie transformuje się do postaci:

$$\hat{H} = \sum_{i,j}^{\infty} H_{i,j}^0 \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,i',j,j'} V_{i,i',j,j'} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i'}^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_{j'}, \quad (25)$$

gdzie

$$H_{i,j}^0 = \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} \varphi_i^*(\tilde{x}) \left(-\frac{1}{2} \partial_{\tilde{x}}^2 + g_\omega \tilde{x}^2 \right) \varphi_j(\tilde{x}), \quad (26)$$

oraz

$$V_{i,i',j,j'} = \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x}' \varphi_i^*(\tilde{x}) \varphi_{i'}^*(\tilde{x}') \left(g\delta(\tilde{x} - \tilde{x}') - g_{dd} v_{dd}^\sigma(\tilde{x} - \tilde{x}') \right) \varphi_j(\tilde{x}) \varphi_{j'}(\tilde{x}'). \quad (27)$$

Zapis równania (25) można uprościć poprzez wprowadzenie operatora pola:

$$\hat{\Psi}(\tilde{x}) = \sum_i \varphi_i(\tilde{x}) \hat{b}_i, \quad (28)$$

który anihiluje cząstkę w punkcie \tilde{x} , niezależnie od tego, w którym stanie ta cząstka się znajduje. Operatory pola spełniają reguły komutacji analogiczne dla tworzących je operatorów kreacji i anihilacji. W przypadku rozważanych w niniejszej pracy bozonów są one następujące:

$$\left[\hat{\Psi}(\tilde{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') \right] = \delta(\tilde{x} - \tilde{x}'), \quad \left[\hat{\Psi}(\tilde{x}), \hat{\Psi}(\tilde{x}') \right] = \left[\hat{\Psi}(\tilde{x})^\dagger, \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') \right] = 0, \quad (29)$$

Korzystając z powyższych własności w formule (25) można otrzymać równanie:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \left[-\frac{1}{2} \partial_{\tilde{x}}^2 + g_\omega \tilde{x}^2 \right] \hat{\Psi}(\tilde{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} d\tilde{x}' \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') \left(g \delta(\tilde{x} - \tilde{x}') - g_{\text{dd}} v_{\text{dd}}^\sigma(\tilde{x} - \tilde{x}') \right) \hat{\Psi}(\tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}). \end{aligned} \quad (30)$$

2.4 Definicja funkcji korelacji

Analiza wyników otrzymanych w ramach niniejszej pracy bazować będzie na gęstości oraz funkcjach korelacji stanu podstawowego zaprezentowanego wcześniej hamiltonianu (30). Jednoatomową gęstość gazu definiuje się jako:

$$\rho(\tilde{x}) := \langle \Psi | \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \hat{\Psi}(\tilde{x}) | \Psi \rangle = \int_{-1/2}^{1/2} dx_2 \dots dx_N |\Psi(\tilde{x}_1 = \tilde{x}, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_N)|^2. \quad (31)$$

Opisuje ona prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w wybranym punkcie przestrzeni położeniowej. Jej uogólnieniem jest gęstość wielocząsteczkowa opisująca prawdopodobieństwo znalezienia wielu atomów jednocześnie w kilku położeniach. W szczególności gęstość dwuatomowa jest opisywana wzorem:

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = \langle \Psi | \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \hat{\Psi}(\tilde{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}') | \Psi \rangle = \int_{-1/2}^{1/2} dx_3 \dots dx_N |\Psi(\tilde{x}_1 = \tilde{x}, \tilde{x}_2 = \tilde{x}', \tilde{x}_3, \dots, \tilde{x}_N)|^2. \quad (32)$$

Analiza przeprowadzona w tej pracy wymagać będzie obliczenia funkcji korelacji drugiego rzędu $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$. Opisuje ona prawdopodobieństwo znalezienia dwóch różnych atomów jednocześnie w punktach \tilde{x} oraz \tilde{x}' . Podobnie jak gęstość, można ją wyrazić poprzez operatory pola:

$$G_2(\tilde{x}, \tilde{x}') := \langle \Psi | \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}) | \Psi \rangle = \rho(\tilde{x}, \tilde{x}') - \delta(\tilde{x} - \tilde{x}') \rho(\tilde{x}). \quad (33)$$

Przedstawiona powyżej funkcja korelacji często prezentowana jest w formie unormowanej oznaczanej symbolem $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$:

$$g_2(\tilde{x}, \tilde{x}') := \frac{G_2(\tilde{x}, \tilde{x}')}{\rho(\tilde{x}) \rho(\tilde{x}')} \quad (34)$$

W dalszej części pracy ważnym parametrem opisującym model będzie oczekiwana odległość pomiędzy cząsteczkami $\lambda(\tilde{x})$ definiowana jako:

$$\lambda(\tilde{x}) := \frac{\int_{-1/2}^{1/2} G_2(\tilde{x}, \tilde{x}') |\tilde{x} - \tilde{x}'| d\tilde{x}'}{\int_{-1/2}^{1/2} G_2(\tilde{x}, \tilde{x}') d\tilde{x}'} \quad (35)$$

W kolejnych rozdziałach pojawi się oznaczenie oczekiwanej odległości bez argumentu położenia \tilde{x} . Będzie to tożsamy z zapisem $\lambda := \lambda(\tilde{x} = 0)$, czyli oczekiwana odległość od cząstki położonej w środku pudła. Podczas analizy długość λ traktowana będzie jako parametr porządku definiujący moment przejścia fazowego pomiędzy stanem gazowym a stanami związanymi.

3 Przypadki graniczne

Przystępując do analizy modelu nową metodą ważne jest przygotowanie zestawu danych porównawczych pozwalających oszacować jej dokładność. W tym rozdziale przedstawione zostaną kluczowe charakterystyki wyznaczone dla przypadków możliwych do rozwiązania metodami analitycznymi.

3.1 Cząstki swobodne

Model, w którym $g = 0$ oraz $g_{\text{dd}} = 0$ opisuje gaz wzajemnie nieoddziałujących cząstek. W takim przypadku hamiltonian (21) redukuje się do postaci:

$$\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{1}{2} \sum_j^N \partial_{\tilde{x}_j}^2 + g_\omega \sum_j^N \tilde{x}_j^2. \quad (36)$$

Może on zostać rozseparowany na człony zależne wyłącznie od położenia pojedynczych cząstek $\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = \hat{H}(\tilde{x}_1) + \hat{H}(\tilde{x}_2) + \dots + \hat{H}(\tilde{x}_N)$. Pozwala to łatwo zapisać stany własne pełnego hamiltonianu w bazie funkcji jednoatomowych. Funkcja falowa stanu podstawowego przyjmuje postać:

$$\Psi_0(\tilde{\mathbf{x}}) = \prod_j^N \varphi_0(\tilde{x}_j), \quad (37)$$

gdzie funkcja $\varphi_0(\tilde{x})$ jest najniższym energetycznym rozwiązaniem zagadnienia własnego hamiltonianu jednej cząstki w potencjale harmonicznym z periodycznymi warunkami brzegowymi:

$$\hat{H}(\tilde{x})\varphi_0(\tilde{x}) = \left(-\frac{1}{2}\partial_{\tilde{x}}^2 + g_\omega \tilde{x}^2\right)\varphi_0(\tilde{x}) = \tilde{E}_0\varphi_0(\tilde{x}). \quad (38)$$

W rozważanym tu przypadku bez oddziaływań gęstość jednoatomowa i dwuatomowa wyrażają się wzorami:

$$\rho(\tilde{x}) = \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x}_2 \dots d\tilde{x}_N |\Psi(\tilde{x}_1 = \tilde{x}, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_N)|^2 = |\varphi_0(\tilde{x})|^2, \quad (39)$$

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N |\Psi(\tilde{x}_1 = \tilde{x}, \tilde{x}_2 = \tilde{x}', \tilde{x}_3, \dots, \tilde{x}_N)|^2 = |\varphi_0(\tilde{x})|^2 |\varphi_0(\tilde{x}')|^2, \quad (40)$$

i pozwalają zdefiniować funkcję korelacji $G_2(x, x')$:

$$G_2(\tilde{x}, \tilde{x}') = |\varphi_0(\tilde{x}_1)|^2 (|\varphi_0(\tilde{x}_2)|^2 - \delta(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)). \quad (41)$$

Gdy zewnętrzny potencjał zanika, tj. gdy $g_\omega \rightarrow 0$ rozwiązaniem jest funkcja stała $\varphi_0(\tilde{x}) = 1$ o zerowej energii $\tilde{E}_0 = 0$. Dla bardzo silnych potencjałów pułapkujących ($g_\omega \gg 1$) warunki brzegowe przestają mieć znaczenie i funkcja jednoatomowa przyjmuje postać tożsamą z najniższym stanem własnym oscylatora harmonicznego o odpowiedniej częstotliwości.

3.2 Gaz w reżimie Tonksa-Girardeu

W przypadku oddziaływań kontaktowych dążących do nieskończoności ($g \rightarrow \infty$) układ wchodzi w reżim gazu Tonksa-Girardeu (T-G) [32]. Charakteryzuje się on fermionizacją funkcji własnej opisującej układ:

$$\Psi(\tilde{\mathbf{x}}) = \prod_{j' < j} \text{sgn}(\tilde{x}_{j'} - \tilde{x}_j) \Psi^F(\tilde{\mathbf{x}}) = \prod_{j' < j} \text{sgn}(\tilde{x}_{j'} - \tilde{x}_j) \hat{A} \left[\prod_{j'}^N \varphi_{j'}(\tilde{x}_{j'}) \right], \quad (42)$$

gdzie $\Psi^F(\tilde{\mathbf{x}}) = \hat{\mathcal{A}} \left[\prod_j^N \varphi_j(\tilde{x}_j) \right]$ to funkcja falowa opisująca układ N nieoddziaływających fermionów. Dla cząstek zamkniętych w jednowymiarowym pudle:

$$\varphi_j(\tilde{x}) = \exp(i2\pi k_j \tilde{x}), \quad (43)$$

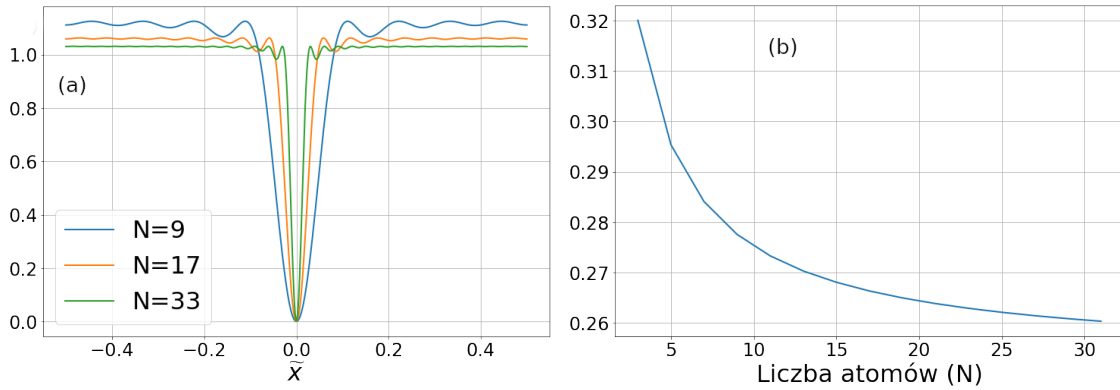
przy czym wektory falowe dla nieparzystej liczby cząstek dane są wzorami $k_j = -\frac{N+1}{2} + j$, gdzie $j = 1, 2, \dots, N$. Energia całkowita układu jest równa energii kinetycznej atomów:

$$\tilde{E}_{TG} = 2\pi^2 \sum_{j=1}^N k_j^2 \quad (44)$$

Fermionizacja układu pozwala na obliczenie gęstości dwucząstkowej i funkcji korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$ gazu w reżimie silnych oddziaływań. Jak pokazano w 8.1:

$$g_2(\tilde{x}, \tilde{x}') = \frac{1}{N(N-1)} \left(N^2 - \left(\frac{\sin(N\pi(\tilde{x} - \tilde{x}'))}{\sin(\pi(\tilde{x} - \tilde{x}'))} \right)^2 \right), \quad (45)$$

która w granicy dużej liczby cząstek została wyliczona już w pierwszej pracy Girardeau [32]. Korzystając z funkcji korelacji (93) możliwe jest wyznaczenie średniej odległości pomiędzy atomem w środku pudła a pozostałymi atomami (λ). Wyniki obliczeń zaprezentowano na rysunku 2.



Rysunek 2: Na rysunku zaprezentowano (a) funkcje korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ obliczone dla gazu Tonksa-Girardeau na podstawie równania (93) dla kilku przykładowych liczb atomów (N) oraz (b) oczekiwaną odległość pomiędzy atomami (λ) obliczoną dla modeli o różnych liczbach atomów (N).

3.3 Gaz bez oddziaływań dipolowych

Gaz atomowy, w którym brak jest oddziaływań dipolowych ($g_{dd} = 0$) i potencjału zewnętrznego ($g_w = 0$) opisuje model Lieba-Linigera [33, 18]. Hamiltonian cząstek oddziaływających wyłącznie kontaktowo ma postać:

$$\hat{H}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \partial_{\tilde{x}_j}^2 + g \sum_{j < j'}^N \delta(\tilde{x}_j - \tilde{x}_{j'}). \quad (46)$$

Jest to jeden z niewielu modeli wielociałowych, których funkcje falowe i relacje dyspersji można wyznaczyć analitycznie. Autorzy pracy [18] skorzystali z faktu, że oddziaływanie jest istotne jedynie wtedy, gdy atomy znajdują się w tym samym miejscu. W pozostałych punktach przestrzeni cząstki poruszają się swobodnie. Model działa poprawnie dla dowolnie silnych oddziaływań odpychających, a w swoich skrajnych przypadkach

przechodzi płynnie w układ cząstek nieoddziałujących ($g \rightarrow 0$) lub gaz T-G ($g \rightarrow \infty$). Wszystkie stany własne modelu Lieba-Linigera mają postać [18]:

$$\Psi(\vec{x}) = \mathcal{N} \sum_{\sigma} A_{\sigma} e^{i \sum_{j=1}^N k_{\sigma j} \tilde{x}_j}, \quad (47)$$

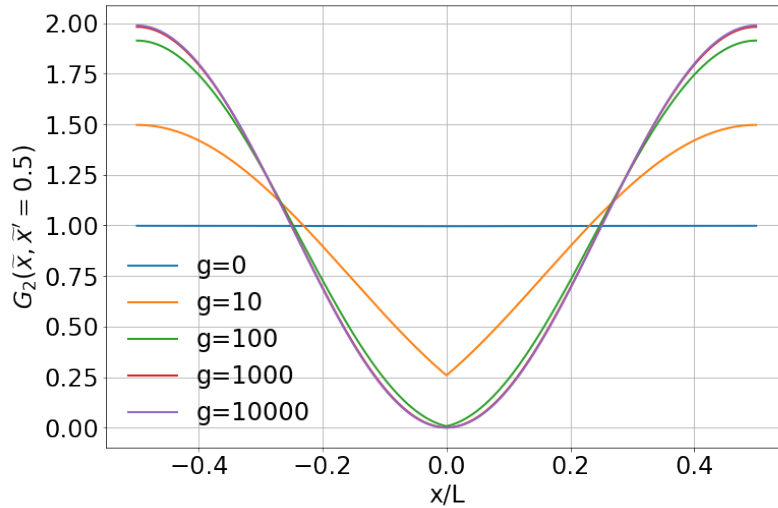
gdzie \mathcal{N} to czynnik normalizacyjny, sumowanie przebiega po wszystkich permutacjach σ stosowanych na N -elementowym zbiorze (tzw. quasi-pędów) k_1, \dots, k_N oraz

$$A_{\sigma} = (-1)^{\sigma} \prod_{j>l} (k_{\sigma j} - k_{\sigma l} - ig \operatorname{sgn}(\tilde{x}_j - \tilde{x}_l)). \quad (48)$$

Quasi-pędy spełniają równania

$$k_j = 2\pi I_j - 2 \sum_{l \neq j}^N \arctan \left(\frac{k_j - k_l}{g} \right), \quad (49)$$

gdzie $\{I_1, \dots, I_N\}$ to zbiór liczb indeksujących różne stany własne. Energia całkowita stanu własnego jest sumą kwadratów quasi-pędów podzieloną przez dwa $\tilde{E}_{LL} = \frac{1}{2} \sum_j^N k_j^2$. Analityczne obliczenie wartości parametrów k_j już dla kilku atomów jest trudne. Układ równań (49) pozwalających je wyznaczyć da się rozwiązać numerycznie co pozwala szybko obliczyć energie zadanych układów, z czego skorzystano tworząc rysunek 3. Stan podstawowy układu o parzystej liczbie cząstek opisany jest przez $I_j = -(N+1)/2 + j$ dla $j = 1, 2, \dots, N$.



Rysunek 3: Grafika prezentuje funkcje korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ obliczone dla modelu Lieba-Linigera składającego się z $N = 2$ atomów. Jak można zauważyć dla oddziaływań większych niż $g = 100$ układ wchodzi w reżim gazu Tonksa-Girardeau i wraz ze wzrostem siły oddziaływań funkcja korelacji nie zmienia znacząco swojego kształtu.

Nawet znając rozwiązanie modelu Lieba-Linigera nie jest łatwo obliczyć funkcje korelacji układów z dużą liczbą cząstek. Ze względu na symetryzację i wynikającą z niej konieczność budowania funkcji falowej jako sumy po wszystkich możliwych permutacjach quasi-pędów cząstek wyznaczenie funkcji korelacji już dla kilku

atomów staje się niewykonalne. W przypadku $N = 2$ jest to jednak osiągalne. Stan podstawowy w takim układzie ma symetrycznie rozmieszczone quasi-pędy, $k_1 = -k_2$, $k_2 > k_1$, co prowadzi do relacji:

$$k_2 = \pi - 2\arctan\left(\frac{k_2 - k_1}{g}\right) = \pi - 2\arctan\left(\frac{2k_2}{g}\right), \quad (50)$$

$$A_1 = k_2 - k_1 - ig \operatorname{sgn}(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1) = 2k_2 - ig \operatorname{sgn}(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1), \quad (51)$$

$$A_2 = k_2 - k_1 + ig \operatorname{sgn}(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1) = 2k_2 + ig \operatorname{sgn}(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1). \quad (52)$$

Funkcja falowa ma postać:

$$\begin{aligned} \Psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) &= \mathcal{N} \sum_{\sigma}^2 A_{\sigma} e^{i \sum_{j=1}^2 k_{\sigma j} \tilde{x}_j} = \mathcal{N} \left(A_1 e^{i(k_1 \tilde{x}_1 + k_2 \tilde{x}_2)} + A_2 e^{i(k_2 \tilde{x}_1 + k_1 \tilde{x}_2)} \right) \\ &= \mathcal{N} \left(A_1 e^{i(k_2 \tilde{x}_2 - k_2 \tilde{x}_1)} + A_2 e^{i(k_2 \tilde{x}_1 - k_2 \tilde{x}_2)} \right). \end{aligned} \quad (53)$$

Po wstawieniu powyższej formuły (53) do równań definiujących funkcje korelacji otrzymano charakterystyki przedstawione na rysunku 3.

3.4 Dwie cząstki oddziałujące dipolowo

Stany własne układu złożonego z dwóch cząstek opisanych hamiltonianem (21) można wyznaczyć metodami numerycznymi. Operator energii redukuje się do postaci:

$$\tilde{H}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = -\frac{1}{2}\partial_{\tilde{x}_1}^2 - \frac{1}{2}\partial_{\tilde{x}_2}^2 + g\delta(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) - g_{\text{dd}}v_{\text{dd}}^{\sigma}(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) + g_{\omega}\tilde{x}_1^2 + g_{\omega}\tilde{x}_2^2. \quad (54)$$

Zmienne \tilde{x}_1 oraz \tilde{x}_2 opisujące położenia cząstek można zastąpić położeniem środka masy układu $Y = (\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2)/2$ oraz różnicą położenia atomów $y = \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2$. Hamiltonian po przejściu do nowego układu współrzędnych przyjmuje postać [34]:

$$\tilde{H}(Y, y) = -\frac{1}{4}\partial_Y^2 + 2g_{\omega}Y^2 - \partial_y^2 + g\delta(y) - g_{\text{dd}}v_{\text{dd}}^{\sigma}(y) + g_{\omega}\frac{y^2}{2}. \quad (55)$$

Powyższy operator daje się rozseparować na sumę operatorów rozpiętych na wzajemnie niezależnych przestrzeniach Hilberta:

$$\hat{H}(Y, y) = \hat{H}^Y(Y) + \hat{H}^y(y), \quad (56)$$

gdzie

$$\hat{H}^Y(Y) = -\frac{1}{4}\partial_Y^2 + 2g_{\omega}Y^2, \quad (57)$$

$$\hat{H}^y(y) = -\partial_y^2 + g\delta(y) - g_{\text{dd}}v_{\text{dd}}^{\sigma}(y) + g_{\omega}\frac{y^2}{2}. \quad (58)$$

Funkcja falowa stanu podstawowego hamiltonianu (54) przyjmuje postać:

$$\Psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = \Phi(Y)\phi(y) = \Phi\left(\frac{\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2}{2}\right)\phi(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2). \quad (59)$$

Część hamiltonianu zależna od położenia środka masy, $\hat{H}^Y(Y)$, jest tożsama z operatorem energii opisanym w rozdziale 3.1. Podobnie jak w omówionym tam przypadku dla słabych potencjałów zewnętrznych funkcja

falowa będąca jego najniższym stanem własnym ma postać $\Phi(Y) \approx 1$. W takiej sytuacji funkcja falowa stanu podstawowego hamiltonianu (54) redukuje się do

$$\Psi(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = \Phi(Y)\phi(y) \approx \phi(y) = \phi(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2), \quad (60)$$

a gęstość dwuatomowa jest dana wyrażeniem

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = |\phi(\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2)|^2. \quad (61)$$

Wyznaczenie funkcji falowej $\phi(y)$ jest zadaniem trudnym do przeprowadzenia metodami analitycznymi. Optymalnym rozwiązaniem jest zapisanie macierzy hamiltonianu odpowiadającej operatorowi (58) w bazie jednocząstkowej,

$$\hat{H}^y = \sum_{i,j}^M H_{i,j}^y |\varphi_i\rangle \langle \varphi_j|, \quad (62)$$

gdzie

$$H_{i,j}^y = \langle \varphi_i | \hat{H}^y(y) | \varphi_j \rangle \quad (63)$$

a następnie przeprowadzenie numerycznej diagonalizacji. W opisywanym tu przypadku w hamiltonianie pojawiają się oddziaływanie typu delta, które jest trudne do badań numerycznych w bazie położeniowej. Rozwiązaniem jest wykorzystanie do obliczeń bazy fal płaskich $\{|\varphi_j\rangle\}$ o postaci danej jako $\langle y | \varphi_j \rangle = \varphi_j(y) = \exp(i2\pi k_j y)$, gdzie $k_j = -(M+1)/2 + j$, $j = 1, 2, \dots, M$. Elementy macierzowe H_{ij}^y przyjmują postać

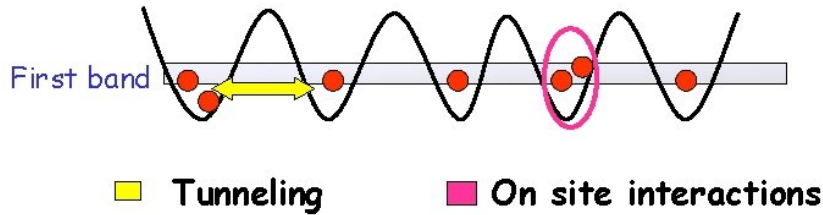
$$\begin{aligned} H_{i,j}^y &= \langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_j \rangle = 4\pi^2 \tilde{k}_j^2 \delta_{i,j} + g + \int_{-1/2}^{1/2} dy \varphi_i^*(y) \left(\frac{1}{2} g_\omega y^2 - g_{dd} v_{dd}^\sigma(\tilde{y}) \right) \varphi_j(y). \\ &= 4\pi^2 \tilde{k}_j^2 \delta_{i,j} + g + \int_{-1/2}^{1/2} dy \left(\frac{1}{2} g_\omega y^2 - g_{dd} v_{dd}^\sigma(y) e^{i2\pi(j-i)\tilde{y}} \right). \end{aligned} \quad (64)$$

4 Metody obliczeniowe

Algorytmy opierające się na numerycznej renormalizacji przestrzeni Hilberta są od niemal 30 lat jednymi z podstawowych metod analizy jednowymiarowych kwantowych systemów skorelowanych [4]. Zostały one opracowane na potrzeby poszukiwania stanów podstawowych hamiltonianów takich układów jak model Heisenberga czy model Hubbarda, jednak dzięki swej elastyczności doskonale nadają się do badań dowolnych modeli dających się przedstawić w postaci łańcucha oddziałujących na krótkim dystansie węzłów (zwanym też „oczka”). Dobrym przykładem ilustrującym stojącą za nimi ideę jest model Bosego-Hubbarda opisywany hamiltonianem (65):

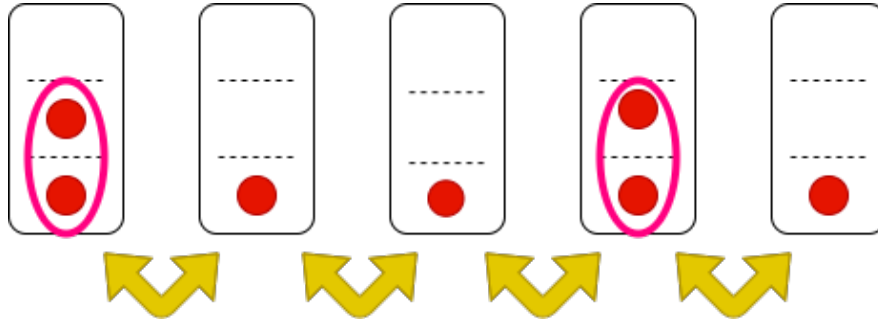
$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{m=1}^{M-1} (\hat{b}_m \hat{b}_{m+1}^\dagger + h.c.) + U \sum_{m=1}^M \hat{n}_m (\hat{n}_m - 1), \quad (65)$$

gdzie m indeksuje węzły sieci, M to liczba węzłów, J to całka przeskokowa pomiędzy sąsiednimi węzłami, zwana współczynnikiem tunelowania, natomiast U to współczynnik oddziaływania między parą bozonów w jednym oczku. Symbole \hat{b}_m oraz \hat{n}_m oznaczają odpowiednio bozonowy operator anihilacji atomu oraz operator liczby bozonów w m -tym węźle sieci. Model ten często jest wykorzystywany do badania atomów uwięzionych w jednowymiarowej pułapce, której przykład pokazano na rysunku 4. Zaprezentowano tam układ sieci optycznej złożonej z $M = 5$ węzłów i $N = 7$ atomów. Rysunek ten przedstawia układ, w których faktycznie występują minima potencjału pułapujące atomy, które interpretowane są jako węzły. Zastosowanie modelu Bosego-Hubbarda jest jednak szersze. "Węzły" mogą oznaczać dowolny stan jednoatomowy.



Rysunek 4: Rysunek przedstawia quasi-jednowymiarową sieć optyczną z pięcioma lokalnymi minimami potencjału. Uwięzione w niej bozony oddziałują ze sobą tylko jeśli znajdują się w tym samym węźle. Mają również możliwość tunelowania do sąsiednich węzłów, jednak nie mogą opuścić systemu jako całości [2].

W zastosowaniach numerycznych istotnym parametrem jest wymiar lokalny oznaczany jako d . Jest to maksymalna dopuszczalna w implementacji numerycznej liczba stanów pojedynczego węzła, czyli w opisywanym tu przypadku liczba atomów mogąca pojawić się w węźle, zaczynając od zera do $d - 1$. Schemat przedstawiony na rysunku 5 przedstawia układ $N = 7$ atomów uwięzionych w sieci składającej się z $M = 5$ węzłów, każdy o lokalnym wymiarze $d = 4$. Dowolny stan całego układu można zapisać w reprezentacji obsadzeń korzystając z bazy stanów $\{|\mathbf{n}\rangle\} \equiv \{|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_5\rangle\}$, gdzie $n_m < d$ oznacza obsadzenie m -tego węzła. Wielkość przestrzeni Hilberta modelu to d^M , czyli w tym przypadku 4^5 stanów.



Rysunek 5: Zachowanie atomów uwięzionych w sieci optycznej zaprezentowanych na rysunku 4 można opisać korzystając z uproszczonego modelu łańcucha składającego się z $M = 5$ węzłów. Tunelowanie atomów typowe dla modelu ciągłego odwzorowane jest poprzez całkę przeskoku J i może nastąpić jedynie do sąsiednich oczek. Oddziaływanie dwóch atomów w jednym oczku opisane jest przez potencjał U . W prezentowanym tu przypadku sztucznie ograniczono maksymalną liczbę atomów w węźle do $maxOcc = 3$, czyli w każdym oczku mogą znajdować się 0,1,2 lub 3 bozony. Ograniczenie to nie występuje w systemach rzeczywistych. Zabieg ten ma na celu jedynie ograniczenie wymiaru przestrzeni Hilberta i obniżenie stopnia złożoności ewentualnych obliczeń.

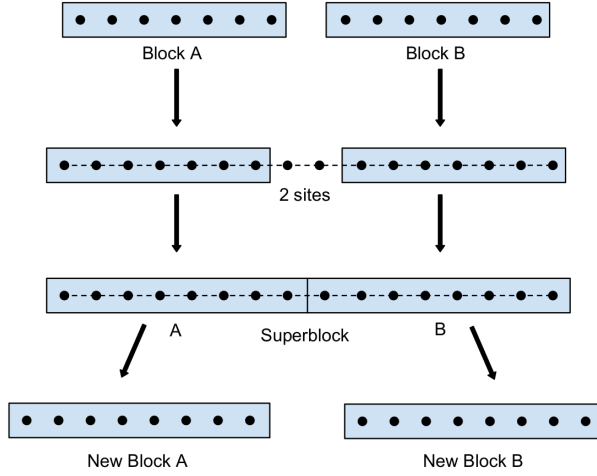
4.1 DMRG

Do prowadzenia przybliżonych obliczeń w modelach takich jak (65) często stosowana jest zaproponowana w pracy [35] technika Renormalizacji Macierzy Gęstości, znana powszechnie pod angielską nazwą Density Matrix Renormalization Group (DMRG). Jej algorytm składa się z dwóch części – Infinite Size DMRG (iDMRG) oraz Finite Size DMRG (fDMRG).

4.1.1 iDMRG

Proces iDMRG rozpoczyna się od przygotowania bloków A oraz B, jak to pokazano na grafice 6. Każdy z nich opisuje grupę węzłów z bazą składającą się z D stanów. Algorytm zakłada, że łańcuch będzie iteracyjnie rozbudowywany – w każdym kroku pomiędzy bloki A oraz B dokładane są dwa nowe węzły. Pełny łańcuch ma w tym momencie strukturę typu (Blok A)-węzeł-węzeł-(Blok B), co dalej będzie zapisywane jako $A \bullet \bullet B$ i nazywane superblokiem.

Gdyby nie stosowano przybliżeń wielkość bazy stanów układu powinna rosnać wykładniczo, w każdej iteracji zwiększając się d^2 krotnie. Celem algorytmu DMRG jest uniknięcie tego dzięki obcięciu przestrzeni Hilberta superbloku do wyjściowego wymiaru D^2 stanów w taki sposób, by jak najlepiej odwzorować za ich pomocą wektor stanu podstawowego.



Rysunek 6: Rysunek przedstawia cztery podstawowe kroki algorytmu Infinite Size DMRG [3]. Cykl rozpoczyna się od przygotowania dwóch niezależnych bloków A oraz B o bazach stanów odpowiednio $\{|\alpha\rangle_A\}$ oraz $\{|\alpha\rangle_B\}$. Każda z baz ma wymiar nie większy niż D stanów. Bloki A oraz B są opisane hamiltonianami \hat{H}_A oraz \hat{H}_B , z których każdy działa wyłącznie na węzły własnego bloku. Pierwszym krokiem algorytmu jest dołączenie do łańcucha pary nowych węzłów w taki sposób, by znalazły się pomiędzy blokami A oraz B. Taka struktura nazywana jest superblokiem. Dowolny stan superbloku można wyrazić poprzez superpozycję stanów tworzących go podukładów, tak jak pokazano w (66). Hamiltonian opisujący superblok jest sumą hamiltonianów elementów składowych oraz oddziaływań pomiędzy nimi. Uwzględniając maksymalny zasięg oddziaływania równy jednemu oczku, tj. najprostszej sytuacji: $\hat{H}_{A\bullet\bullet B} = \hat{H}_A + \hat{H}_a + \hat{H}_b + \hat{H}_B + \hat{H}_{A\bullet} + \hat{H}_{\bullet B} + \hat{H}_{\bullet\bullet}$, gdzie hamiltoniany \hat{H}_A oraz \hat{H}_B opisują bloki A oraz B, a operatory \hat{H}_a oraz \hat{H}_b opisują pojedyncze oczka, tutaj odpowiednio węzeł sąsiadujący z blokiem A oraz węzeł sąsiadujący z blokiem B. Kolejne człony hamiltonianu wprowadzają oddziaływania pomiędzy elementami łańcucha – $\hat{H}_{A\bullet}$ pomiędzy blokiem A oraz sąsiadującym z nim węzłem, $\hat{H}_{\bullet\bullet}$ pomiędzy środkowymi węzłami oraz $\hat{H}_{\bullet B}$ pomiędzy blokiem B a sąsiadującym z nim węzłem. W kolejnym kroku hamiltonian $\hat{H}_{A\bullet\bullet B}$ jest diagonalizowany, a na podstawie jego stanu podstawowego tworzona jest macierz gęstości superbloku. Następnie dzięki skorzystaniu ze śladu częściowego macierz ta podlega separacji na podukłady opisywane macierzami gęstości $\hat{\rho}_A$ oraz $\hat{\rho}_B$ (67). Po tym etapie łańcuch ponownie jest rozseparowany na dwa niezależne bloki A oraz B.

Dowolny stan superbloku można wyrazić jako:

$$|\Psi\rangle_{A\bullet\bullet B} = \sum_{\alpha_A, \alpha_B} \sum_{\sigma_A, \sigma_B} \Psi_{\alpha_A, \sigma_A, \sigma_B, \alpha_B} |\alpha\rangle_A |\sigma\rangle_A |\sigma\rangle_B |\alpha\rangle_B = \sum_{i_A, j_B} \Psi_{i_A j_B} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (66)$$

gdzie $\{|\sigma\rangle_A\}$ oraz $\{|\sigma\rangle_B\}$ są bazami stanów centralnych węzłów i składają się z d -stanów każda. $\{|i\rangle_A\}$ oraz $\{|j\rangle_B\}$ są bazami stanów bloków $A\bullet$ oraz $\bullet B$. Po skonstruowaniu superbloku wykonywana jest numeryczna diagonalizacja hamiltonianu $\hat{H}_{A\bullet\bullet B}$, dzięki której znajdują się stan podstawowy $|\Psi_0\rangle$. Opisany tu algorytm skupia się na tym w jaki sposób optymalnie obciąć bazę by tego stanu "nie uszkodzić". Pierwszym krokiem procedury jest separacja superbloku na część opisującą $A\bullet$ oraz $\bullet B$. Dzieje się to poprzez obliczenie zredukowanych macierzy gęstości podukładów $A\bullet$ oraz $\bullet B$:

$$\begin{aligned} \rho_{A\bullet} &= Tr_{\bullet B} |\psi_0\rangle \langle \psi_0|, \\ \rho_{\bullet B} &= Tr_{A\bullet} |\psi_0\rangle \langle \psi_0|. \end{aligned} \quad (67)$$

Zredukowaną macierz gęstości można łatwo zapisać w postaci diagonalnej rozwiązując jej zagadnienie własne. Otrzymane wektory własne to stany przestrzeni Hilberta na której macierz jest rozpięta. Ciąg D nieujemnych wartości własnych stanowi wagi poszczególnych stanów bazowych. Spośród wektorów własnych macierzy gęstości podukładu wybieranych jest D stanów o największej wadze i tworzona jest z nich nowa baza podukładu A oraz analogicznie podukładu B . Hamiltonian oraz pozostałe obserwabla zostają do niej przepisane, po czym cały cykl jest powtarzany. Zakończenie procesu iDMRG następuje w momencie skonstruowania łańcucha o zadanej przez badacza długości.

Zastosowana tu metoda obcięcia przestrzeni Hilberta jest optymalna, tj. różnica między wektorem stanu podstawowego zapisanym w pełniej bazie superbloku $|\Psi\rangle_0$ oraz jego odpowiednik zapisany w nowej, obciętej bazie $|\Psi'\rangle_0$ są do siebie tak podobne jak tylko to możliwe. Oznacza to, że błąd popełniany podczas obcięcia ϵ (ang. truncation error) jest minimalny:

$$\epsilon := \|\psi\rangle_0 - |\psi'\rangle_0\|_2^2 = \min_{\psi} \|\psi\rangle_0 - |\psi\rangle_F\|_F^2 \quad (68)$$

gdzie $|\psi'\rangle_0 = \sum_{ij} \Psi'_{ij} |i\rangle'_A |j\rangle'_B$, a symbol $\|X\|_F^2$ oznacza normę Frobeniusa. Tezę zawartą w równaniu (68) można udowodnić korzystając z rozkładu macierzy według wartości osobliwych.

4.1.2 Rozkład według wartości osobliwych

Rozkład według wartości osobliwych (ang. Singular Value Decomposition, SVD) to twierdzenie algebry liniowej stanowiące, że dla dowolnej prostokątnej macierz M o wymiarach $N_A \times N_B$ istnieje dekompozycja

$$M = USV^\dagger, \quad (69)$$

taka, że U jest macierzą o wymiarach $N_A \times \min(N_A, N_B)$ z ortonormalnymi kolumnami, S jest macierzą diagonalną o wymiarach $\min(N_A, N_B) \times \min(N_A, N_B)$ z nieujemnymi elementami $s_i := S_{ii}$. Macierz V^\dagger ma wymiary $\min(N_A, N_B) \times N_B$ i ortonormalne wiersze. Współczynniki s_i nazywane wartościami osobliwymi (ang. Singular Values, SV) i bez straty ogólności można założyć, że $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_r > 0$. Rząd macierzy jest definiowany jako liczba niezerowych wartości osobliwych.

$$\begin{array}{c}
 \boxed{M} = \boxed{U} \times \boxed{S} \times \boxed{V^\dagger} \\
 \\
 \boxed{M'} = \boxed{U} \times \begin{array}{|c|c|} \hline \boxed{S} & 0 \\ \hline 0 & 0 \\ \hline \end{array} \times \boxed{V^\dagger}
 \end{array}$$

Rysunek 7: Wizualizacja rozkładu macierzy M oraz M' według wartości osobliwych. Dowolna macierz M może zostać zapisana jako iloczyn macierzy U , S oraz V^\dagger . Zastępując część najmniejszych co do modułu elementów macierzy S zerami można uzyskać macierz M' w optymalny sposób odwzorowującą macierz M dla ograniczonej liczby stanów rozpinającej ją bazy, czyli minimalizującą wyrażenie $\|M - M'\|_F^2$.

Metoda SVD pozwala w łatwy sposób stworzyć macierz M' o rzędzie $r' < r$ taką, która będzie najlepszym przybliżeniem macierzy M przy wybranej wielkości bazy r' , czyli taką, dla której wyrażenie $\|M - M'\|_F^2$ jest minimalne. Nową macierz definiuje się jako:

$$M' := US'V^\dagger, \quad (70)$$

gdzie $S' = \text{diag}(s_1, s_2, \dots, s_{r'}, 0, \dots)$. Właściwość taką można wykorzystać do optymalnego obcięcia bazy stanów, w której zapisany jest wektor stanu z równania (66):

$$|\Psi\rangle = \sum_i^{N_A} \sum_j^{N_B} \Psi_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (71)$$

gdzie $\{|i\rangle_A\}$ oraz $\{|j\rangle_B\}$ są ortonormalnymi bazami podprzestrzeni A oraz B z wymiarami odpowiednio N_A oraz N_B . Rozpisując macierz współczynników Ψ_{ij} zgodnie z formułą SVD:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{ij} \sum_{a=1}^{\min(N_A, N_B)} U_{ia} S_{aa} V_{ja}^* |i\rangle_A |j\rangle_B = \sum_{a=1}^{\min(N_A, N_B)} \left(\sum_i^{N_A} U_{ia} |i\rangle_A \right) s_a \left(\sum_j^{N_B} V_{ja}^* |j\rangle_B \right) \\ &= \sum_{a=1}^{\min(N_A, N_B)} s_a |a\rangle_A |a\rangle_B. \end{aligned} \quad (72)$$

Ze względu na ortonormalność kolumn macierzy U oraz wierszy macierzy V^\dagger zbiory $\{|a\rangle_A\}$ oraz $\{|a\rangle_B\}$ również są ortonormalne i mogą rozpinąć nową bazę dla bloków A oraz B. Możemy ograniczyć się do sumowania tylko po $D \leq \min(N_A, N_B)$ dodatnich wartości osobliwych:

$$|\Psi'\rangle = \sum_{a=1}^D s_a |a\rangle_A |a\rangle_B \quad (73)$$

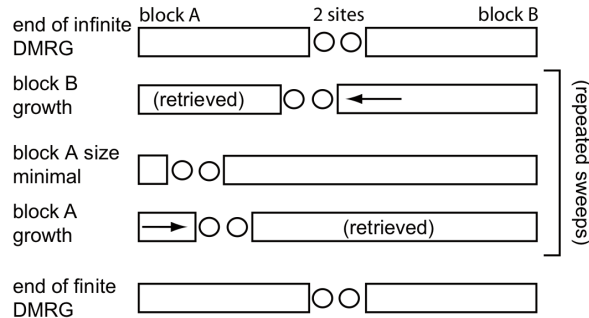
Przy czym postać wektorów $|a\rangle_A, |a\rangle_B$ oraz wartości s_a^2 najłatwiej znaleźć rozwiązując zagadnienie własne dla zredukowanych macierzy gęstości ρ_A oraz ρ_B zdefiniowanych w równaniu (67), ponieważ zapisane w swoich stanach własnych mają postać:

$$\begin{aligned} \rho_A &= \sum_{a=1}^{N_A} s_a^2 |a\rangle_{AA} \langle a|, \\ \rho_B &= \sum_{a=1}^{N_B} s_a^2 |a\rangle_{BB} \langle a|, \end{aligned} \quad (74)$$

gdzie ich wartości własne są kwadratami kolejnych wartości osobliwych. Taka metoda obcięcia przestrzeni konfiguracyjnej pozwala uzyskać najlepszą zgodność pomiędzy stanem podstawowym w bazach początkowej i końcowej [3].

4.1.3 fDMRG

Zadaniem algorytmu fDMRG jest iteracyjne korygowanie bazy wyznaczonej podczas procesu iDMRG.



Rysunek 8: Na rysunku zaprezentowano cykl przebiegów (ang. sweeps) procesu fDMRG [4].

Proces rozpoczyna się podobnie do wcześniej fazy. Blok B jest zwiększany poprzez dodanie do niego jednego węzła. Następnie znajdujemy stan podstawowy superbloku, liczone są zredukowane macierze gęstości, po czym następuje przepisanie hamiltonianów bloków A i B do nowych baz. Różnica polega na tym, że rozbudowa bloku B dzieje kosztem bloku A , który stopniowo się kurczy. W zależności od implementacji można albo usunąć skrajnie lewy węzeł bloku A albo skorzystać z przechowywanej w pamięci wcześniejszej, mniejszej wersji bloku.

Proces ten jest kontynuowany do czasu aż blok A będzie na tyle mały, że cała baza stanów tworzących go węzłów będzie mieścić się w D stanach. Po osiągnięciu tego punktu odwraca się kierunek ekspansji - teraz to blok A będzie się rozrastać kosztem bloku B . Gdy blok B skurczy się do minimalnego rozmiaru kierunek znów się odwraca i proces jest kontynuowany do chwili, gdy znów dwa bloki będą mieć taką samą liczbę węzłów, jak to pokazano na ilustracji 8.

Takie przebiegi (ang. sweeps) są powtarzane do momentu aż układ osiągnie zbieżność, czyli do chwili gdy zmiana energii układu liczona pomiędzy kolejnymi przebiegami nie będzie powodować dużej zmiany wartości oczekiwanej wybranej przez badacza obserwabli.

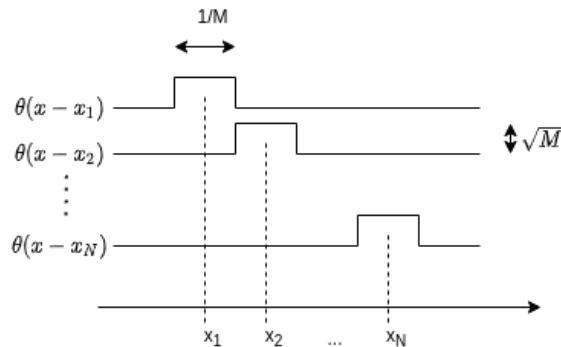
W początkach swojej historii DMRG skupiało się głównie na pierwszej części algorytmu - iDMRG [36]. Późniejsze korygowanie przestrzeni konfiguracyjnej było zaledwie dodatkiem do procesu. Ostatnie lata wiążą się ze zmianą priorytetów. Nowoczesne algorytmy korzystające z rozbudowanego aparatu matematycznego, np. z sieci tensorowych (ang. Matrix Product State, MPS) praktycznie całkiem rezygnują z iDMRG. Oczekują one od użytkownika zadania w formie produktowej stanu początkowego całego układu i od tego punktu wyjściowego rozpoczynają obliczenia.

4.2 Baza obliczeniowa

Wykorzystanie metody DMRG wymaga zdefiniowania bazy, w której prowadzone będą obliczenia. Powinna dać się ona łatwo zapisać w bazie stanów Focka i zostać dobrana w taki sposób, by maksymalny zasięg oddziaływań nie przekraczał kilku oczek [4, 30]. Dla badanego w niniejszej pracy hamiltonianu (30) optymalnym rozwiązaniem jest baza stanów Focka, w której cząstki mogą obsadzać stany jednoatomowe $\theta(\tilde{x})$ dyskretyzujące przestrzeń położeń (rysunek 9). Są one definiowane jako:

$$\theta(\tilde{x}) = \begin{cases} \sqrt{M} & \tilde{x} \in [-\frac{1}{2M}, \frac{1}{2M}) \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases}, \quad (75)$$

gdzie M to liczba odcinków na jaką podzielono przestrzeń.



Rysunek 9: Baza stanów jednoatomowych $\theta(\tilde{x})$.

Operator pola zapisany w tej bazie stanów przyjmuje postać:

$$\hat{\Psi}(\tilde{x}) = \sum_m^M \hat{b}_m \theta(\tilde{x} - \tilde{x}_m), \quad (76)$$

gdzie $\tilde{x}_m + 1/M = \tilde{x}_{m+1}$.

4.3 Pełna postać hamiltonianu DMRG

Podczas obliczeń ograniczono zasięg oddziaływań dipolowych do maksymalnie trzech węzłów. Końcowa postać hamiltonianu wykorzystywana do obliczeń metodą DMRG została wyprowadzona w rozdziale 8.2 i przyjmuje postać:

$$\hat{H}_D = -J \sum_m^M [\hat{b}_m^\dagger \hat{b}_{m+1} + h.c.] + \sum_m^M U_{ext,m} \hat{n}_m + U_0 \sum_m^M \hat{n}_m^2 + U_1 \sum_m^M \hat{n}_m \hat{n}_{m+1} + U_2 \sum_m^M \hat{n}_m \hat{n}_{m+2} \quad (77)$$

$$+ U_3 \sum_m^M \hat{n}_m \hat{n}_{m+3} + \mu N, \quad (78)$$

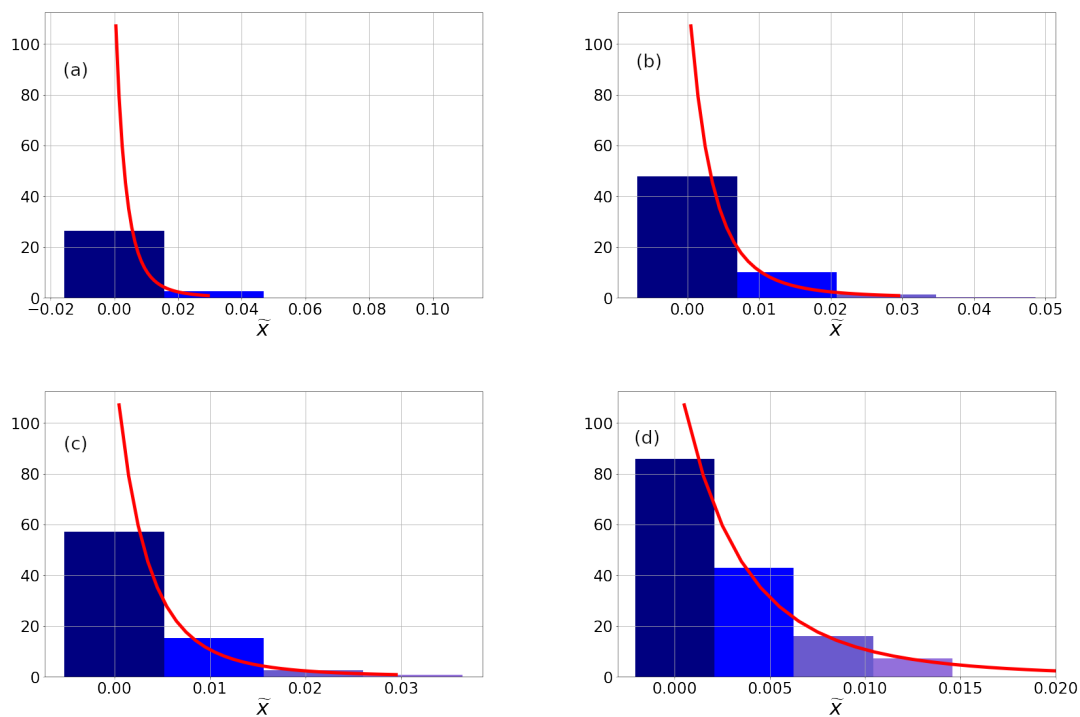
gdzie: $J = \frac{M^2}{2}$, $U_{ext,m} = g_\omega(m - M/2)^2$, $U_0 = \frac{gM - g_{dd}v_0^\sigma}{2}$, $U_1 = -g_{dd}v_1^\sigma$, $U_2 = -g_d v_2^\sigma$, $U_3 = -g_{dd}v_3^\sigma$, $\mu = M^2 + \frac{g_\omega}{12M^2} + \frac{g_{dd}v_0^\sigma - gM}{2}$.

4.4 Elementy macierzowe v_{dd}^σ

Wyznaczenie współczynników v_{dd}^σ pojawiających się w (107) metodami analitycznymi jest skomplikowane. W niniejszej pracy zostały one obliczone poprzez całkowanie numeryczne. Przykładowe wartości kilku najistotniejszych z nich są następujące:

Parametry modelu	v_0^σ	v_1^σ	v_2^σ	v_3^σ
$M = 60, \sigma = 0.005$	4.2451e+01	7.5935e+00	7.5209e-01	2.1023e-01
$M = 72, \sigma = 0.005$	4.7939e+01	1.0084e+01	1.2179e+00	3.5334e-01
$M = 84, \sigma = 0.005$	5.2782e+01	1.2671e+01	1.8041e+00	5.4378e-01
$M = 96, \sigma = 0.005$	5.7079e+01	1.5301e+01	2.5040e+00	7.8422e-01
$M = 108, \sigma = 0.005$	6.0913e+01	1.7935e+01	3.3083e+00	1.0759e+00
$M = 120, \sigma = 0.005$	6.4353e+01	2.0544e+01	4.2057e+00	1.4189e+00

Porównując graficznie postać oddziaływań modelu ciągłego i jego dyskretnego odpowiednika (rysunek 10) można zauważyć, że różnice między nimi są czymś więcej niż jedynie efektem całkowania pola pod wykresem. Kształt potencjału dipolowego nakłada ograniczenia na liczbę węzłów układu. Jeśli węzłów będzie zbyt mało stanie się on niemal równoważny z oddziaływaniem kontaktowym - jego wkład będzie odczuwalny jedynie na jednym węźle. Jeśli z kolei węzłów w modelu będzie zbyt dużo ograniczenie się do trzech węzłów zasięgu oddziaływań wymusi odcięcie istotnej części potencjału.



Rysunek 10: Powyższe grafiki przedstawiają potencjał ciągły $v_{\text{d}}^{\sigma}(\tilde{x})$ obliczony dla $\sigma = 0.005$ (oznaczony czerwoną linią). Niebieskie słupki to wartości elementów macierzowych $v_0^{\sigma}, v_1^{\sigma}, v_2^{\sigma}$ oraz v_3^{σ} . Wykresy ilustrują współczynniki obliczone dla długości łańcucha równej (a) $M = 32$, (b) $M = 72$, (c) $M = 96$ oraz (d) $M = 240$ węzłów.

5 Testy zbieżności

Przed przystąpieniem do obliczeń przeprowadzono serię testów zbieżności, które pozwoliły wyznaczyć optymalne parametry numeryczne. Najważniejsze z nich to ilość węzłów łańcucha (M), maksymalne dozwolone obsadzenie jednego oczka ($maxOcc$), maksymalny błąd odcięcia (ϵ) oraz maksymalna liczba stanów bazy (D).

5.1 Liczba węzłów i maksymalne obsadzenie

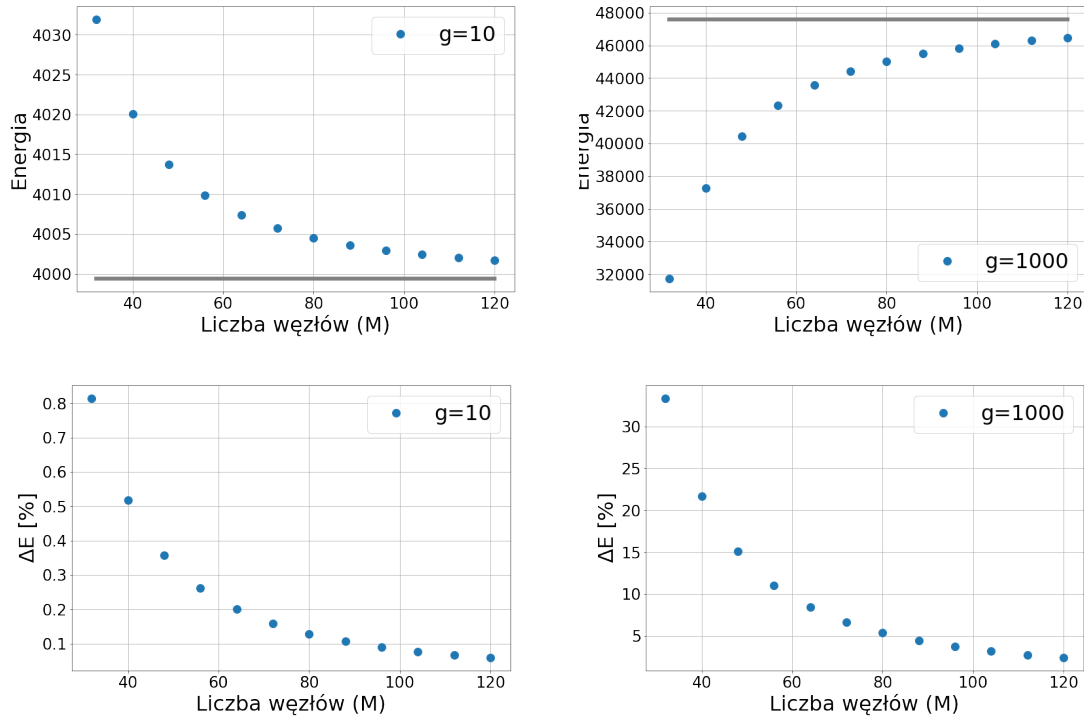
Optymalizacja rozpoczęła się od ustalenia współczynników mogących zmienić fizykę modelu. Liczba węzłów (M) oznacza również liczbę odcinków, na które podzielono przestrzeń. Zwiększenie tego parametru powinno prowadzić do poprawy jakości otrzymywanych wyników, jednak powoduje wzrost czasu obliczeń i ilość alokowanej pamięci komputera. Te niekorzystne efekty rosną liniowo wraz ze zwiększaniem się wielkości układu. Wydłużanie łańcucha ma jednak jeszcze jedną wadę - w analizowanym tu modelu występują oddziaływania nielokalne o określonym zasięgu. Hamiltonian dla którego prowadzone będą obliczenia odtwarza oddziaływania nielokalne tylko na dystansie trzech węzłów. Z tego powodu wraz ze wzrostem liczby M maleje zasięg potencjałów, które mogą być badane.

Złożenie wszystkich tych czynników wymusza wybór optymalnej wartości parametru. Najtrudniejszym numerycznie przypadkiem jest model z $N = 32$ cząstkami. To on jako pierwszy powinien utracić zgodność z modelem ciągłym w przypadku zbyt małej liczby węzłów. Był to zatem idealny kandydat na przeprowadzenie testów zbieżności. Ich rezultaty zostały przedstawione i omówione na rysunku 11.

Drugim współczynnikiem mającym bezpośrednie przełożenie na właściwości modelu jest maksymalne obsadzenie jednego węzła. Niniejsza praca poświęcona jest analizie modelu oddziałujących lokalnie cząstek, zatem dopuszczalne obsadzenie nie może być niższe niż dwie cząstki na węzeł. Wszystkie wartości dopuszczające większą liczbę atomów w węzle mogą być przybliżeniami modelu ciągłego, jednak w idealnym odwzorowaniu były by to nieskończone maksymalne obsadzenia (co w przypadku ograniczonej liczby cząstek sprowadza się do maksymalnego obsadzenia $maxOcc = N$). Wyniki testów zbieżności zostały przedstawione na ilustracji 12.

5.2 Maksymalny błąd odcięcia i maksymalna wielkość bazy

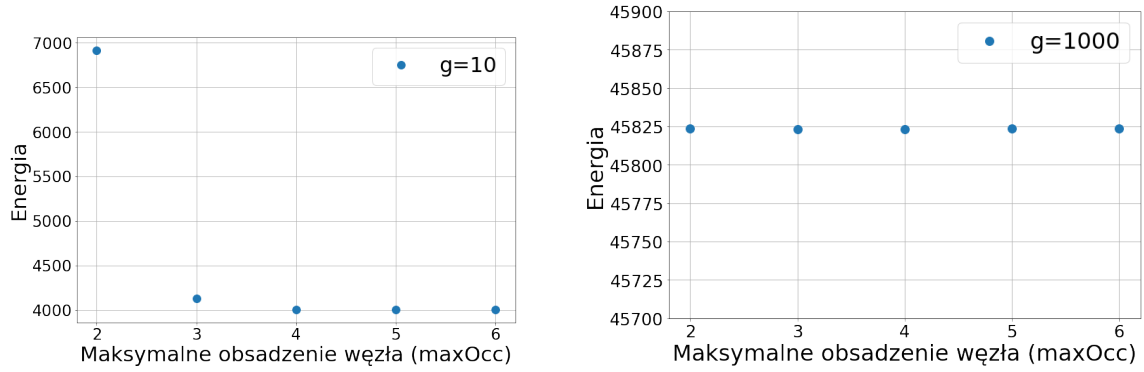
Dwa pozostałe parametry numeryczne nie powinny mieć wpływu na fizykę układu, ale definiują ostateczną precyzję obliczeń. Mowa tu o maksymalnej wielkości bazy (D) oraz maksymalnym dopuszczalnym błędzie odcięcia ($cutoff$, ϵ). Obie te wartości ściśle się ze sobą wiążą. Wykorzystywana do obliczeń biblioteka `iTensor` [37] domyślnie prowadzi obliczenia tak, by utrzymać się tuż powyżej zadanego pułapu precyzji, korzystając przy tym z minimalnej do tego wymaganej liczby stanów bazy. Takie podejście ma wiele zalet praktycznych - jeśli podczas poszukiwania stanu podstawowego uda się utrzymać maksymalny błąd na odpowiednio niskim poziomie można mieć pewność, że nie odrzucono przypadkowo żadnego kluczowego stanu bazy, a utrzymanie jak najmniejszej liczby linkowanych stanów pozwala prowadzić obliczenia szybko. Dla użytkownika oznacza to, że priorytetem jest wybór maksymalnego poziomu błędu odcięcia ($cutoff$). Maksymalna liczba stanów bazy powinna zostać dobrana tak, by w przypadku niemożności uzyskania zbieżności przez algorytm program nie próbował zaalokować więcej pamięci komputera niż faktycznie może otrzymać. Dwa ostatnie parametry są więc ze sobą ściśle powiązane - nie da się ustawić dużej precyzji obliczeń (niskiego $cutoff/u$) dla modelu ze zbyt małą maksymalną liczbą stanów bazy ($maxDim$). W publikacjach często przyjmuje się, że satysfakcjonującym poziomem precyzji obliczeń DMRG są przypadki, gdy udało się utrzymać błąd odcięcia ($cutoff$) na poziomie nie większym niż 10^{-8} i taki właśnie pułap utrzymywany będzie w niniejszej pracy.



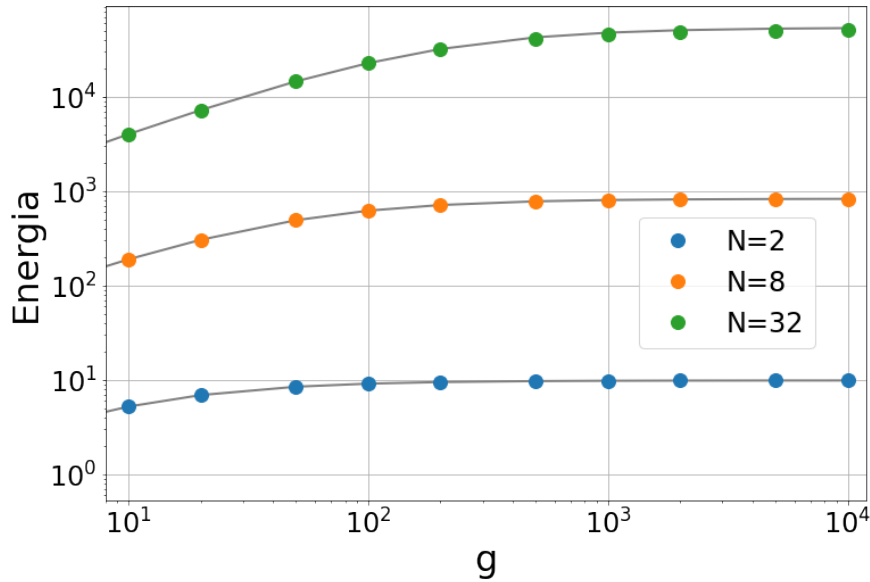
Rysunek 11: Na rysunku zaprezentowano zależności energii stanu podstawowego wyznaczone dla łańcuchów o różnych liczbach węzłów. Obliczenia prowadzono dla $N = 32$ atomów, maksymalnego poziomu obsadzeń $maxOcc = 5$ oraz maksymalnego błędu odcięcia $\epsilon = 10^{-8}$. Szarą linią oznaczono obliczoną analitycznie energię modelu Liebha-Linigera o odpowiednich parametrach. W przypadku gdy oddziaływania między cząstkami są słabe ($g = 10$) nawet dla krótkich łańcuchów wyniki numeryczne niemal pokrywają się z analitycznymi. Gdy oddziaływania stają się silniejsze ($g = 1000$) zachowaniem precyzji wymaga znacznie dłuższych łańcuchów. W dalszej części pracy obliczenia prowadzone są dla $M = 96$ węzłów, co jest dobrym kompromisem pomiędzy precyzją a kosztem obliczeń.

5.3 Porównanie z modelem ciągłym

Przeprowadzona we wcześniejszych podrozdziałach analiza zbieżności pozwala stwierdzić, że obliczenia zostały wykonane poprawnie. Nie wyklucza jednak ewentualnych błędów popełnionych podczas przejścia od modelu ciągłego do reprezentacji dyskretnej. Aby ocenić czy cały proces – od wyprowadzenia matematycznego do obliczeń – został przeprowadzony poprawnie konieczne jest zestawienie wyników obliczeń z danymi obliczonymi w rozdziale 3. Analizę rozpoczęto od porównania energii z modelu Liebha-Linigera oraz DMRG. Wyniki uzyskane dla trzech przykładowych układów o różnych liczbach atomów zostały przedstawione na grafice 13.

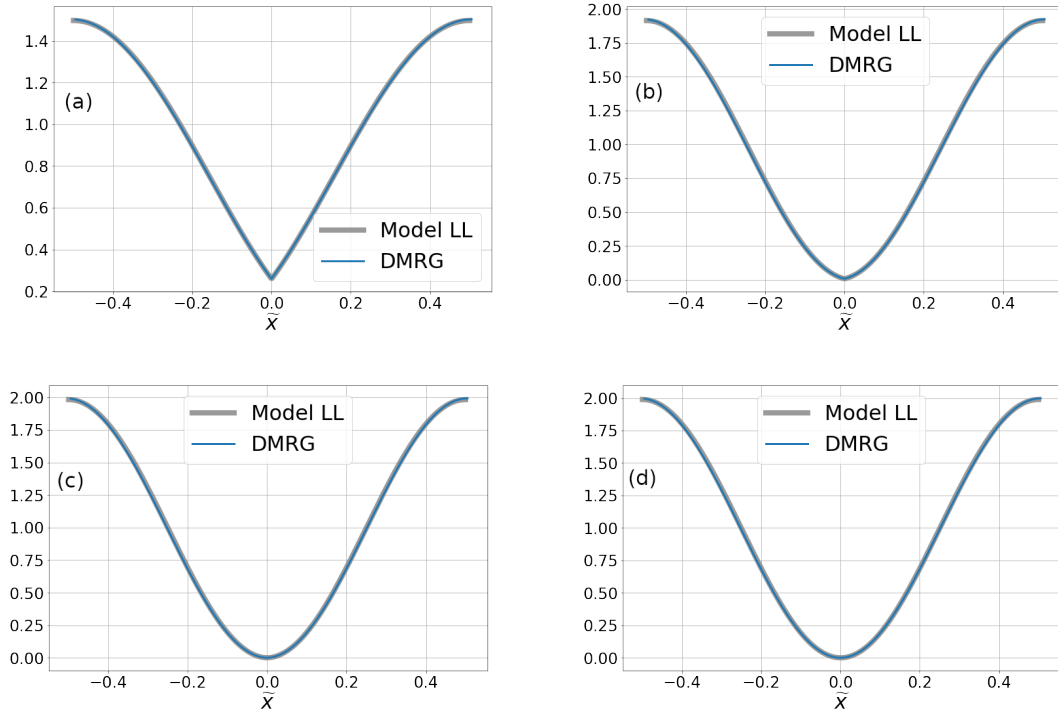


Rysunek 12: Na rysunku zaprezentowano zależność energii stanu podstawowego wyznaczone metodą DMRG dla różnych maksymalnych poziomów obsadzeń węzła ($maxOcc$). Jak można zauważyć w przypadku słabych oddziaływań energia bardzo silnie zależy od maksymalnej liczby cząstek, które mogą znaleźć się w jednym punkcie. Do uzyskania pełnej zbieżności konieczne jest stosowanie dużych baz obliczeniowych pozwalających na jednoczesne obsadzenie węzła nawet przez pięć bozonów. Gdy oddziaływania kontaktowe stają się silniejsze układ wchodzi w reżim bliski przypadkowi gazu Tonksa-Girardeau. Obsadzenie tego samego węzła już przez trzy atomy jednocześnie jest niemal zerowe. Obliczenia przeprowadzono dla $N = 32$ atomów na łańcuchu o długości $M = 96$ przy maksymalnym błędzie odcięcia $\epsilon = 10^{-8}$. Oddziaływania dipolowe oraz zewnętrzny potencjał harmoniczny zostały wyłączone ($g_{dd} = g_{\omega} = 0$).



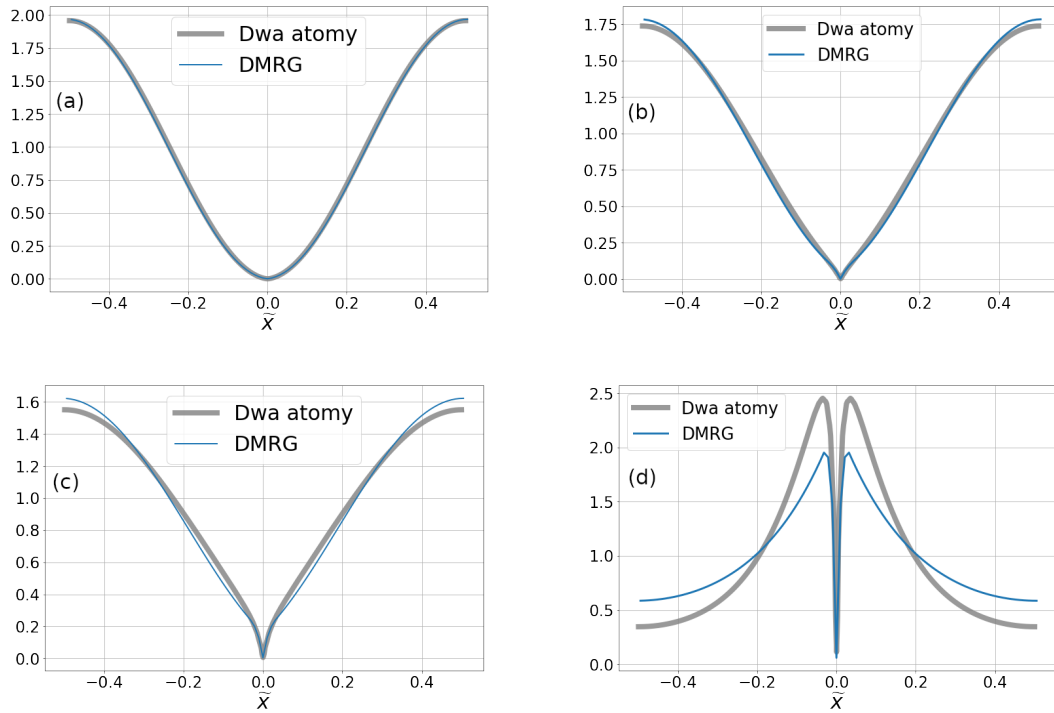
Rysunek 13: Na rysunku zestawione zostały ze sobą energia stanu podstawowego modelu Lieb-Linigera 3.3 obliczona analitycznie (szare linie) z energią stanu podstawowego obliczonego metodą DMRG.

Energie obliczone obiema metodami zgadzają się z dokładnością do kilku procent co jest w pełni satysfakcjonującym poziomem. Kolejną obserwacją poddaną kontroli to funkcja korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ wyznaczona dla układu $N = 2$ atomów na podstawie funkcji falowej modelu Lieb-Linigera oraz obliczona numerycznie przez algorytm DMRG. Wyniki zaprezentowane na grafice 14 świadczą o poprawnym wykonaniu obliczeń.



Rysunek 14: Na powyższej grafice prezentowane jest zestawienie funkcji korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ wyznaczonych dla modelu Lieb-Linigera oraz wyników obliczeń DMRG. Rachunki przeprowadzone zostały dla parametrów $M = 96$, $\epsilon = 10^{-8}$. Ilustracje przedstawiają wyniki dla (a) $g = 10$, (b) $g = 100$, (c) $g = 1000$ oraz (d) $g = 10000$.

Rozwinięciem analizy z rysunku 14 jest zestawienie korelacji dwucząstkowych dla przypadku z niezerowymi oddziaływaniami dipolowymi. Wyniki analizy zostały zaprezentowane na rysunku 15, gdzie ponownie można stwierdzić zgodność wyników modeli ciągłych z danymi wyznaczonymi metodą DMRG. Świadczy to o poprawnym wyprowadzeniu hamiltonianu (78) i implementacji algorytmu. Przeprowadzona tu analiza pozwala przystąpić do właściwych obliczeń.



Rysunek 15: Na grafice przedstawiono zestawienie funkcji korelacji $g_2(\tilde{x}, \tilde{x}' = 0)$ wyznaczonych dla modelu dwuatomowego opisanego w rozdziale 3.4 (szare linie) oraz wyników obliczeń DMRG (niebieskie linie). Obliczenia przeprowadzono dla $M = 96$, $\epsilon = 10^{-8}$ oraz $g = 1000$. Grafiki ilustrują wyniki uzyskane dla (a) $f_{dd} = 0.1$, (b) $f_{dd} = 0.3$, (c) $f_{dd} = 0.33$ oraz (d) $f_{dd} = 0.4$, gdzie $f_{dd} = g_{dd}/g$.

6 Wyniki

W tym rozdziale zaprezentowane zostały najważniejsze wyniki otrzymane metodą DMRG dla układu oddziałujących dipolowo atomów umieszczonych w pudle z periodycznymi warunkami brzegowymi. Badano przypadek quasi-jednowymiarowy, to znaczy układ, w którym w kierunkach poprzecznych, nieanalizowanych w tej pracy, atomy są utrzymywane przez ciasną pułapkę harmoniczną. Taka geometria jest zbliżona do prawdziwych fizycznych układów doświadczalnych [7]. Obliczenia przeprowadzono dla hamiltonianu (78), który stanowi odwzorowanie operatora energii modelu oddziałujących dipolowo atomów w ciągłej przestrzeni quasi-jednowymiarowej (21).

Badania przybliżone, oparte na teorii pola średniego [28] przewidują istnienie co najmniej trzech faz materii: krople kwantowe i solitonów nazywanych tu zbiorczo stanami związanymi oraz typowej fazy gazowej, w której gaz wypełnia całą utrzymującą go pułapkę. Te trzy fazy różnią się między sobą oczekiwaną odległością pomiędzy tworzącymi je atomami, oznaczaną tutaj symbolem λ , zdefiniowaną w równaniu (35).

Dla przypadku, w którym wszystkie oddziaływania maleją do zera – czyli dla gazu doskonałego – położenia różnych atomów nie są ze sobą skorelowane. Jeśli jeden z atomów zostanie znaleziony w punkcie $\tilde{x} = 0$ nie wpłynie to w żaden sposób na oczekiwane położenia innych atomów. Nadal z równym prawdopodobieństwem znajdują się one w dowolnym punkcie przestrzeni. W tej sytuacji oczekiwana odległość między dwoma atomami w pudle o unormowanej długości $L = 1$ wynosić będzie $\lambda = 0.25$.

W przypadku oddziałujących atomów w fazie gazowej atomy rozmieszczone są w maksymalnej odległości od siebie nawzajem. Jeżeli podczas eksperymentu zostanie znaleziony atom w środku układu ($\tilde{x} = 0$) to średnia odległość atomów od tego punktu będzie większa niż dla gazu doskonałego $\lambda > 0.25$.

Stany związane, czyli jasne solitony oraz krople kwantowe cechują się odmiennymi właściwościami. Atomy je tworzące przejawiają tendencję do grupowania się. Oznacza to, że znajdując jeden atom w położeniu $\tilde{x} = 0$ można oczekiwać, że kolejny znajduje się w jego pobliżu. Z tego powodu oczekiwana odległość między nimi jest mniejsza niż dla gazu nieoddziałujących atomów. Dla reżimu, w którym formują się krople kwantowe i solitony zachodzi relacja $\lambda < 0.25$.

Poszukiwanie przejść fazowych w niniejszej pracy polegało na zbadaniu oczekiwanej odległości między atomami λ dla stanów podstawowych modeli o różnych liczbach atomów (N) oraz szerokim zakresie współczynników g oraz g_{dd} , wyznaczających odpowiednio siłę odpychających oddziaływań kontaktowych oraz przyciągających dipolowych. Wyznaczenie wartości parametru λ wymaga znajomości funkcji korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$, która to można uzyskać jedynie metodami wielociałowymi.

Na Rysunkach 16,17, 18 oraz 19 przedstawione zostały diagramy fazowe obliczone numerycznie metodą DMRG zaimplementowaną w bibliotece *iTensor* [37]. Model ciągły na podstawie którego przygotowany został eksperyment numeryczny opisany jest hamiltonianem (21) z parametrem $\sigma = 0.005$.

6.1 Parametry obliczeń numerycznych

Wszystkie prezentowane poniżej dane zostały obliczone dla modelu opisanego hamiltonianem (78) w bazie składającej się z $M = 96$ węzłów przy maksymalnym obsadzeniu jednego oczka równym $maxOcc = 5$ atomów. Wyjątek stanowią modele, w których całkowita liczba cząstek jest niższa niż pięć, tam maksymalne obsadzenie było równe całkowitej liczbie cząstek. Stan startowy symulacji dla każdego przypadku był identyczny i opisany stanem produktowym, w którym na N środkowych węzłach układu znajdowało się po jednym atomie:

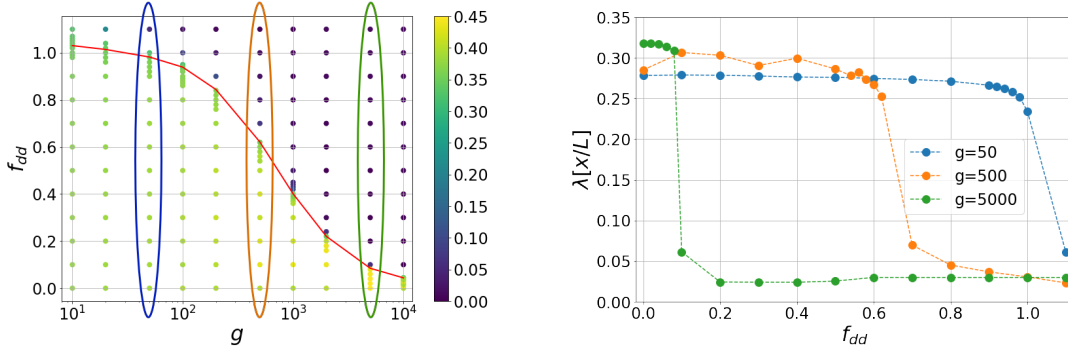
$$|START\rangle = |0\rangle^{\otimes(M-N)/2} \otimes |1\rangle^{\otimes N} \otimes |0\rangle^{\otimes(M-N)/2}. \quad (79)$$

Maksymalny błąd odcięcia ustawiony został na poziomie $\epsilon = 10^{-8}$ przy jednoczesnym ograniczeniu maksymalnej liczby stanów bazy do $D = 860$ lub $D = 1024$, gdzie ta druga wartość wykorzystywana była dla szczególnie trudnych pod względem numerycznym punktów na granicy faz. Liczba przebiegów została dobra-

na dla każdego przypadku indywidualnie w taki sposób, by uzyskać zbieżność energii, czyli do momentu gdy $\frac{|E_s - E_n|}{E_n} \leq 0.005[\%]$, gdzie $E_s - E_n$ to zmiana energii układu podczas ostatniego przebiegu.

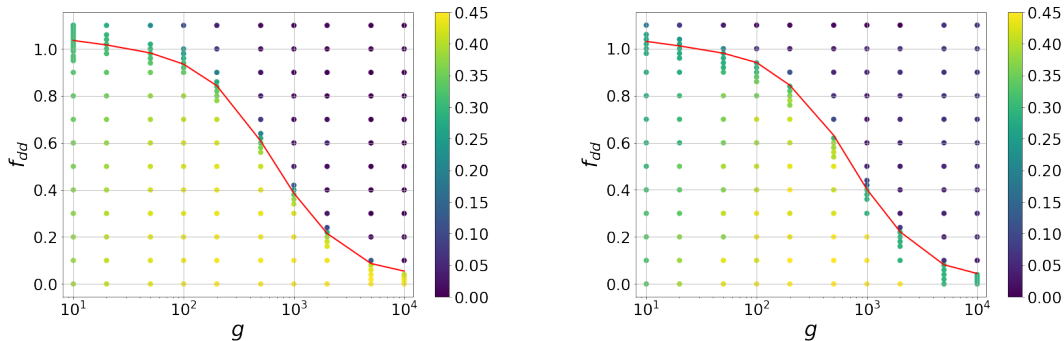
6.2 Diagramy fazowe

Prezentacja wyników rozpocznie się od przedstawienia diagramów ilustrującego oczekiwaną odległość między atomami (λ). W przypadku gazu oddziałującego wyłącznie kontaktowo ($f_{dd} = 0$) odległość jest duża i wynosi w przybliżeniu trzy dziesiąte długości pudła. Pojawienie się w modelu oddziaływań dipolowych nie zmienia w znacznym stopniu właściwości układu aż do momentu osiągnięcia wartości krytycznej, po przekroczeniu której następuje gwałtowny spadek odległości między atomami. Zostało to zaprezentowane na rysunku 16 dla trzech przykładowych wartości parametru g .

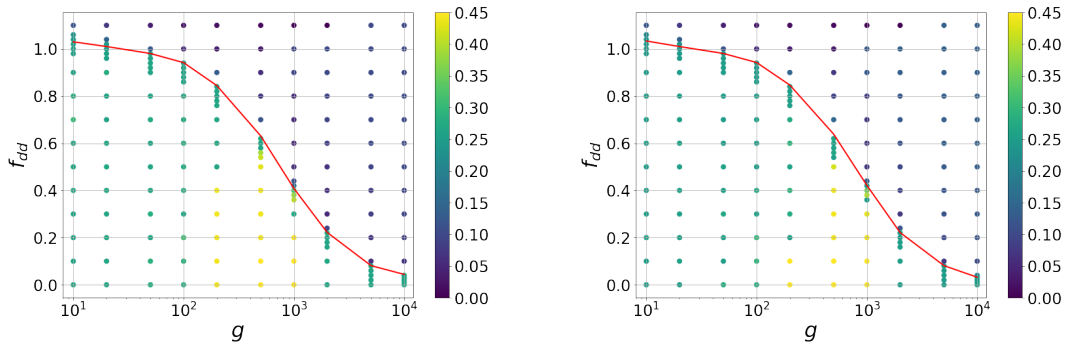


Rysunek 16: Na wykresie prezentowana jest wartość parametru λ dla układu złożonego z $N = 8$ atomów. Po lewej znajduje się pełny diagram fazowy przedstawiający oczekiwaną odległość między atomami, wyznaczaną korzystając z metody DMRG. Po prawej znajdują się przekroje wykonane dla linii $g = 50, 500$ oraz 5000 . Widać na nich skokową zmianę oczekiwanych odległości świadczącą o istnieniu przejścia fazowego.

Podobne zachowanie układu można obserwować także dla innych liczb atomów N tworzących układ. Zaprezentowane na ilustracjach 17 oraz 18 diagramy również charakteryzują się skokową zmianą średniej odległości między atomami dla niewielkiej zmiany parametru f_{dd} .

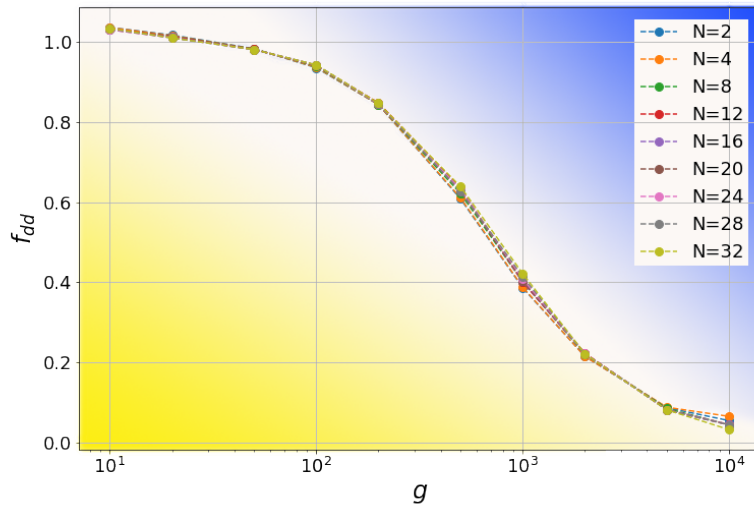


Rysunek 17: Na wykresach prezentowana jest wartość parametru λ wyznaczona dla różnych zestawów parametrów g oraz f_{dd} . Ilustracje przedstawiają wyniki dla (od lewej) $N = 2$ oraz $N = 16$ atomów.



Rysunek 18: Na wykresach prezentowana jest wartość parametru λ wyznaczona dla różnych zestawów parametrów g oraz f_{dd} . Ilustracje przedstawiają wyniki dla (od lewej) $N = 24$ oraz $N = 32$ atomów.

Szczególnie interesujący jest fakt, że wyznaczone punkty przejścia niemal się pokrywają niezależnie od gęstości gazu. Na diagramie 19 zebrane zostały punkty przejścia fazowego wyznaczonego dla różnych liczb atomów. Zgodność zebranych tam charakterystyk pozwala postawić tezę, że moment przejścia fazowego jest niezależny od liczby cząstek (w przestrzeni $g - f_{dd}$).



Rysunek 19: Na wykresie zaznaczone zostały punkty, w których długość λ przekracza umowną granicę pomiędzy gazem a stanami związanymi interpretowaną tu jako przejście fazowe. Zostały tu zebrane wyniki obliczone dla różnych liczb atomów. Jak można zauważyć, linia zmiany fazy praktycznie nie zależy od liczby atomów tworzących układ. Kolorem żółtym oznaczono zasięg występowania typowej fazy gazowej w której cząstki rozmieszczone są w maksymalnych odległościach od siebie nawzajem. Kolor niebieski to strefa formowania się stanów związanych takich jak krople kwantowe i solitony.

7 Wnioski i plany na przyszłość

Celem projektu opisanego w niniejszej pracy było opracowanie i przetestowanie metody pozwalającej prowadzić obliczenia wielociałowe dla układów bozonów uwięzionych w quasi-jednowymiarowych wnękach potencjału korzystając z metody DMRG. Plan ten został w pełni zrealizowany. Dyskretyzacja hamiltonianu pozwoliła uzyskać dobrą zgodność pomiędzy wynikami otrzymanymi metodą DMRG oraz wynikami obliczeń analitycznych, co pokazano w rozdziale 5.3.

Metoda DMRG pozwoliła wykonać serię diagramów fazowych, na podstawie których stwierdzono, że w modelu opisanym hamiltonianem (21) występuje przejście fazowe. Analiza została przeprowadzona dla układów o różnej liczbie atomów (N), co pozwoliło stwierdzić że gęstość gazu nie ma zauważalnego wpływu na punkt przejścia (w przestrzeni parametrów g oraz f_{da}) pomiędzy stanem gazowym a stanami związanymi.

Wykonana w niniejszej pracy adaptacja techniki DMRG do obliczeń w modelach ciągłych prowadzi do wielu nowych możliwości. Pozwala przeprowadzić weryfikację wyników otrzymywanych metodami wywodzącymi się z teorii średniego pola. Jest to niezwykle istotne, ponieważ jak już wspomniano we wstępie równania takie jak równanie Grossa-Pitajewskiego oraz LLGPE gwarantują dokładność jedynie dla dużych liczb cząstek i nie jest znany faktyczny zakres ich stosowalności w małych systemach.

Jedną z największych przewag DMRG nad metodami stosowanymi obecnie jest dawana przez nią możliwość wyznaczania funkcji korelacji międzyatomowych. Znajomość tych czysto kwantowych właściwości układu pozwala udzielić odpowiedzi na podstawowe pytania o jego faktyczną budowę wewnętrzną. W niniejszej pracy podstawowa analiza opierała się właśnie na jednej z takich funkcji – korelacji $G_2(\tilde{x}, \tilde{x}')$, na podstawie której obliczano oczekiwaną odległość między atomami. Metody wielociałowe, do których zalicza się DMRG pozwalają obliczyć również inne funkcje korelacji. W szczególności funkcję $G_1(\tilde{x}, \tilde{x}')$, na podstawie której można odpowiedzieć na pytanie o wewnętrzną spójność gazu i jego zdolność do interferencji.

Projekt, którego podsumowaniem jest niniejsza praca ma znaczny potencjał. Rozwijanie go wymagać będzie udoskonalenia procesu przejścia pomiędzy modelami ciągłym i dyskretnym, dokładniejszego porównania wyników DMRG z wynikami otrzymywanymi innymi metodami oraz przeprowadzenia obliczeń ze znacznie lepszą precyzją. Wiąże się to z dużą ilością pracy, jednak potencjalne korzyści wynikające z jej wykonania mogą okazać się ogromne.

Wiedza w dziedzinie kwantowych układów wielu ciał zdobyta podczas realizowania prezentowanego projektu pozwoliła autorowi uzyskać wyniki w projekcie równoległym, dotyczącym badania zakresu stosowalności równań przybliżonych, GPE oraz LLGPE [28]. Wyniki te, wiążące się luźno z projektem, zostaną wkrótce wysłane do recenzji w renomowanym czasopiśmie.

8 Uzupełnienia

8.1 Korelacje w gazie Tonksa-Girardeu

Dla oddziaływań krótkozasiegowych dążących do nieskończoności ($g \rightarrow \infty$) układ wchodzi w reżim gazu Tonksa-Girardeu. Następuje wtedy fermionizacja funkcji falowej opisującej układ:

$$\Psi(\tilde{\mathbf{x}}) = \prod_{i < j} \text{sgn}(\tilde{x}_i - \tilde{x}_j) \Psi^F(\tilde{\mathbf{x}}) = \prod_{i < j} \text{sgn}(\tilde{x}_i - \tilde{x}_j) \hat{\mathcal{A}} \left[\prod_i^N \varphi_i(\tilde{x}_i) \right], \quad (80)$$

gdzie $\Psi^F(\tilde{\mathbf{x}}) = \hat{\mathcal{A}} \left[\prod_j^N \varphi_j(\tilde{x}_j) \right]$ to funkcja falowa opisująca układ N nieoddziałujących fermionów. Dla nieparzystej liczby cząstek zamkniętych w jednowymiarowym pudle:

$$\varphi_j(\tilde{x}) = \exp(i2\pi k_j \tilde{x}), \quad (81)$$

gdzie $k_j = -\frac{N+1}{2} + j$. Dla tak zdefiniowanej funkcji falowej:

$$|\Psi(\tilde{\mathbf{x}})|^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{A}} \sum_{\sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^N \varphi_i^*(\tilde{x}_{\sigma'(i)}) \prod_j^N \varphi_j(\tilde{x}_{\sigma(j)}). \quad (82)$$

Gęstość dwuatomowa gazu przyjmie postać:

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = \int d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^N \varphi_i^*(\tilde{x}_{\sigma'(i)}) \prod_j^N \varphi_j(\tilde{x}_{\sigma(j)}). \quad (83)$$

Możliwe jest sumowanie po permutacjach orbitali zamiast permutacjach położeń:

$$\int d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N |\Psi(\tilde{\mathbf{x}})|^2 = \int d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^N \varphi_{\sigma'(i)}^*(\tilde{x}_i) \prod_j^N \varphi_{\sigma(j)}(\tilde{x}_j). \quad (84)$$

Wyrażenie (84) można rozseparować na człony zależne jedynie od położeń pojedynczych cząstek i przeprowadzić całkowanie każdego z nich niezależnie. Zaczynając obliczenia od \tilde{x}_N :

$$\begin{aligned} \rho(\tilde{x}, \tilde{x}') &= \int d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^N \varphi_{\sigma'(i)}^*(\tilde{x}_i) \prod_j^N \varphi_{\sigma(j)}(\tilde{x}_j) \\ &= \int d\tilde{x}_3 \dots d\tilde{x}_N \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^{N-1} \varphi_{\sigma'(i)}^*(\tilde{x}_i) \prod_j^N \varphi_{\sigma(j)}(\tilde{x}_j) * \varphi_{\sigma'(N)}^*(\tilde{x}_N) \varphi_{\sigma(N)}(\tilde{x}_N) \\ &= \int dx_3 \dots dx_{N-1} \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \prod_i^{N-1} \varphi_{\sigma'(i)}^*(\tilde{x}_i) \prod_j^N \varphi_{\sigma(j)}(\tilde{x}_j) * \int d\tilde{x}_N \varphi_{\sigma'(N)}^*(\tilde{x}_N) \varphi_{\sigma(N)}(\tilde{x}_N). \end{aligned} \quad (85)$$

Wiedząc, że $\int dx_N \varphi_{\sigma'(N)}^*(\tilde{x}_N) \varphi_{\sigma(N)}(\tilde{x}_N) = \delta(\sigma(N) = \sigma'(N))$ i korzystając z tej właściwości dla wszystkich $\tilde{x}_3, \tilde{x}_4, \dots, \tilde{x}_{N-1}$ można otrzymać:

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \sigma' \in \mathcal{A}} (-1)^{\text{sgn}(\sigma) + \text{sgn}(\sigma')} \left[\varphi_{\sigma'(1)}^*(\tilde{x}) * \varphi_{\sigma'(2)}^*(\tilde{x}') * \varphi_{\sigma(1)}(\tilde{x}) * \varphi_{\sigma(2)}(\tilde{x}') \right]. \quad (86)$$

Nie jest już konieczne sumowanie po dwóch niezależnych zbiorach permutacji. Wiadomo, że: $\sigma(3) = \sigma'(3), \sigma(4) = \sigma'(4), \dots, \sigma(N) = \sigma'(N)$. Zostały więc tylko dwa niezależne elementy, co pozawala ograniczyć się do przypadków gdy $\sigma(1) = \sigma'(1)$ i $\sigma(2) = \sigma'(2) \Rightarrow \sigma = \sigma'$ oraz gdy $\sigma(1) = \sigma'(2)$ i $\sigma(2) = \sigma'(1)$. Jeśli obie

permutacje są identyczne jak ma to miejsce w pierwszym przypadku, to $(-1)^{\text{sgn}(\sigma)+\text{sgn}(\sigma')} = 1$. W drugim znaki obu permutacji są różne, zatem $(-1)^{\text{sgn}(\sigma)+\text{sgn}(\sigma')} = -1$:

$$\begin{aligned}\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') &= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{A}} \left[\varphi_{\sigma(1)}^*(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(2)}^*(\tilde{x}') \varphi_{\sigma(1)}(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(2)}(\tilde{x}') - \varphi_{\sigma(2)}^*(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(1)}^*(\tilde{x}') \varphi_{\sigma(1)}(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(2)}(\tilde{x}') \right] \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in \mathcal{A}} \left[|\varphi_{\sigma(1)}(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(2)}(\tilde{x}')|^2 - \varphi_{\sigma(2)}^*(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(1)}^*(\tilde{x}') \varphi_{\sigma(1)}(\tilde{x}) \varphi_{\sigma(2)}(\tilde{x}') \right].\end{aligned}\quad (87)$$

Permutacji takich, że $\sigma(1) = i, \sigma(2) = j$ przy N atomach jest $(N-2)!$. Dla funkcji bozonowych z nieskończonym oddziaływaniem każdy orbital obsadzony jest jednokrotnie, zatem:

$$\rho(\tilde{x}, \tilde{x}') = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{i \neq j}^N \left[|\varphi_i(\tilde{x}) \varphi_j(\tilde{x}')|^2 - \varphi_j^*(\tilde{x}) \varphi_i^*(\tilde{x}') \varphi_i(\tilde{x}) \varphi_j(\tilde{x}') \right]. \quad (88)$$

W niniejszym punkcie rozważane są modele z periodycznymi warunkami brzegowymi. Funkcje korelacji będą zależęć jedynie od wzajemnej różnicy położeń cząstek. Korzystając z tego faktu można bez straty ogólności założyć położenie jednej cząstki, na przykład $\tilde{x} = 0$.

$$\rho(0, \tilde{x}') = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{i \neq j}^N \left[|\varphi_i(0) \varphi_j(\tilde{x}')|^2 - \varphi_j^*(0) \varphi_i^*(\tilde{x}') \varphi_i(0) \varphi_j(\tilde{x}') \right], \quad (89)$$

$$\rho(0, \tilde{x}') = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{i \neq j}^N \left[|\varphi_j(\tilde{x}')|^2 - \varphi_i^*(\tilde{x}') \varphi_j(\tilde{x}') \right] = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{i \neq j}^N \left[1 - e^{i2\pi(k_j - k_i)\tilde{x}'} \right], \quad (90)$$

$$\rho(0, \tilde{x}') = \frac{(N-2)!}{N!} \sum_{j \neq j'}^N \left[1 - e^{i2\pi(j-j')\tilde{x}'} \right] = \frac{(N-2)!}{N!} \left(N(N-1) - \sum_j^N e^{i2\pi j \tilde{x}'} \left(\sum_{j'=1 \neq j}^N e^{i2\pi j' \tilde{x}'} \right) \right). \quad (91)$$

W ten sposób równanie opisujące gęstość dwuatomową sprowadza się do:

$$\rho(0, x) = \frac{(N-2)!}{N!} \left(N(N-1) - \sum_j^N e^{i2\pi j \tilde{x}} \left(e^{i2\pi \tilde{x}} \frac{1 - e^{i2\pi N \tilde{x}}}{1 - e^{i2\pi \tilde{x}}} - e^{i2\pi j \tilde{x}} \right) \right), \quad (92)$$

co po skorzystaniu ze wzoru Eulera i unormowaniu przekształca się do formuły końcowej:

$$g_2(0, \tilde{x}') = \frac{1}{N(N-1)} \left(N^2 - \left(\frac{\sin(N\pi(\tilde{x}'))}{\sin(\pi(\tilde{x}'))} \right)^2 \right). \quad (93)$$

8.2 Dyskretyzacja hamiltonianu

Po podstawieniu do rozważanego w niniejszej pracy hamiltonianu (30) operatora pola (76) otrzymuje się operator postaci:

$$\hat{H} = \hat{H}_K + \hat{H}_{\text{sr}} + \hat{H}_{\text{dd}} + \hat{H}_{\text{zew}}, \quad (94)$$

gdzie \hat{H}_K , \hat{H}_{sr} , \hat{H}_{dd} oraz \hat{H}_{zew} to odpowiednio zdyskretyzowane operatory energii kinetyczną cząstek, energii potencjalnej oddziaływania krótkozasięgowego, daleko-zasięgowego oraz energii potencjalnej wynikającej ze

(słabego) potencjału wiążącego atomy. Ich postać dana jest wzorami

$$\hat{\tilde{H}}_K = -\frac{M^2}{2} \sum_m^M \left[\hat{b}_m^\dagger \hat{b}_{m+1} + \hat{b}_m \hat{b}_{m+1}^\dagger \right] + M^2 N, \quad (95)$$

$$\hat{\tilde{H}}_{sr} = \frac{gM}{2} \sum_m^M \hat{n}_m (\hat{n}_m - 1) = \frac{gM}{2} \sum_m^M \hat{n}_m^2 - \frac{gMN}{2}, \quad (96)$$

$$\hat{\tilde{H}}_{zew} = g_\omega \sum_m^M (m - M/2)^2 \hat{n}_m + \frac{g_\omega \tilde{d}^2 N}{12}. \quad (97)$$

Wyznaczenie członu opisującego energię oddziaływania dipolowego wymaga przeprowadzenia złożonych obliczeń. Bezpośrednie podstawienie operatora pola do definicji hamiltonianu prowadzi do:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{dd} &= -\frac{g_{dd}}{2} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} d\tilde{x}' \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\tilde{x}') v_{dd}^\sigma(\tilde{x} - \tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}') \hat{\Psi}(\tilde{x}) \\ &= -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{i,i',j,j'}^M \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i'}^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_{j'} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} d\tilde{x}' \theta(x - x_i) \theta(\tilde{x}' - \tilde{x}_{i'}) \theta(x - x_j) \theta(\tilde{x}' - \tilde{x}_{j'}) v_{dd}^\sigma(\tilde{x} - \tilde{x}'). \end{aligned} \quad (98)$$

Uwzględniając ortonormalność funkcji $\theta(\tilde{x} - \tilde{x}_i)$ oraz $\theta(\tilde{x} - \tilde{x}_{i'})$ dla $i \neq i'$:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{dd} &= -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{i,i'}^M \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i'}^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_{j'} \int_{-1/2}^{1/2} d\tilde{x} d\tilde{x}' \theta(x - x_i)^2 \theta(x' - x_{i'})^2 v_{dd}^\sigma(\tilde{x} - \tilde{x}') \\ &= -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{i,i'}^M \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i'}^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_{j'} v_{i,i'}^\sigma = -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{m,m'}^M (\hat{n}_m \hat{n}_{m'} - \delta_{m,m'} \hat{n}_m) v_{m,m'}^\sigma. \end{aligned} \quad (99)$$

Dla stałej liczby atomów wyrażenie (99) redukuje się do:

$$\tilde{H}_{dd} = -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{m,m'}^M (\hat{n}_m \hat{n}_{m'} - \delta_{m,m'} \hat{n}_m) v_{m,m'}^\sigma = -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{m,m'}^M v_{m,m'}^\sigma \hat{n}_m \hat{n}_{m'} + \frac{g_{dd} v_{m,m}^\sigma N}{2}. \quad (100)$$

Elementy macierzone $v_{m,m'}^\sigma$ są zależne jedynie od odległości pomiędzy atomami. Pozwala o uprościć wyrażenie poprzez wprowadzenie oznaczenia $y = \tilde{x} - \tilde{x}'$:

$$v_{m,m'}^\sigma = \int dx dx' \theta^2(x - x_m) \theta^2(x' - x_{m'}) v^\sigma(y)_{dd} = \frac{1}{d^2} \int_{x_m - d/2}^{x_m + d/2} dx \int_{x_{m'} - d/2}^{x_{m'} + d/2} dx' v^\sigma(y)_{dd} \quad (101)$$

$$= \frac{1}{d^2} \int_{x_{m'} - x_m - d}^{x_{m'} - x_m + d} f(y) v_{dd}^\sigma(y) dy = \frac{1}{d^2} \int_{(m' - m - 1)d}^{(m' - m + 1)d} f(y) v_{dd}^\sigma(y) dy. \quad (102)$$

Funkcja wagowa $f(y)$ jest zadana jako:

$$f(y) = \begin{cases} y - (m' - m - 1)d & \text{gdy } (m' - m - 1)d \leq y < (m' - m)d \\ -y + (m' - m + 1)d & \text{gdy } (m' - m)d \leq y < (m' - m + 1)d \\ 0 & \text{pozostała przestrzeń} \end{cases} \quad (103)$$

Hamiltonian modelu jest niezmienny względem zamiany $y \rightarrow -y$ i jednorodny. Elementy macierzone dla każdego m będą więc identyczne i niezmiennie w obu kierunkach:

$$v_{m,m'}^\sigma = v_{m-m'}^\sigma = \frac{1}{d^2} \int_{(m' - 1)d}^{(m' + 1)d} f(y) V(y) dy, \quad (104)$$

oraz

$$v_{m-m'}^\sigma = v_{m'-m}^\sigma, \quad (105)$$

a funkcja wagowa uprości się do:

$$f(y) = \begin{cases} y - (m' - 1)d & , y \in [m'd - d, m'd) \\ -y + (m' + 1)d & \text{gdy } m'd \leq y < (m'+1)d \\ 0 & \text{gdy inne.} \end{cases} \quad (106)$$

Finalna postać członu opisującego oddziaływanie dipolowe ma postać:

$$\tilde{H}_{dd} = -\frac{g_{dd}}{2} \sum_{m,m'}^M v_{m-m'}^\sigma \hat{n}_m \hat{n}_{m'} + \frac{g_{dd} v_0^\sigma N}{2} \quad (107)$$

9 Bibliografia

Literatura

- [1] C. Menotti, M. Lewenstein, T. Lahaye, and T. Pfau, “Dipolar interaction in ultra-cold atomic gases,” *AIP Conf. Proc.*, vol. 970, pp. 332–361, Jan 2008.
- [2] phil, “Anna Sanpera. University Hannover Cozumel 2004,” *SlideServe*, Jul 2014.
- [3] Y.-A. Chen and H.-I. Yang, “Density matrix renormalization group.”
- [4] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group: a short introduction,” *Philos. Trans. Royal Soc. A*, vol. 369, pp. 2643–2661, Jul 2011.
- [5] P. N. Jepsen, J. Amato-Grill, I. Dimitrova, W. W. Ho, E. Demler, and W. Ketterle, “Spin transport in a tunable Heisenberg model realized with ultracold atoms,” *Nature*, vol. 588, pp. 403–407, Dec 2020.
- [6] L. Tarruell and L. Sanchez-Palencia, “Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices,” *C. R. Phys.*, vol. 19, pp. 365–393, Sep 2018.
- [7] B. L. Lem, “Creating quantum many-body scars through topological pumping of a 1d dipolar gas,” *Phys. Rev. A*, vol. 99, p. 043632, Apr 2019.
- [8] K. Sacha, *Kondensat Bosego-Einsteina*. Kraków: Instytut Fizyki im. M. Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński, 2004.
- [9] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin, “Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 55, pp. 48–51, Jul 1985.
- [10] E. L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, and D. E. Pritchard, “Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 59, pp. 2631–2634, Dec 1987.
- [11] V. I. Balykin, V. G. Minogin, and V. S. Letokhov, “Electromagnetic trapping of cold atoms,” *Rep. Prog. Phys.*, vol. 63, pp. 1429–1510, Sep 2000.
- [12] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor,” *Science*, vol. 269, pp. 198–201, Jul 1995.
- [13] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
- [14] T. Domański, “Kondensaty bosego-einsteina - przegląd współczesnych realizacji,” *Phys. Rev. A*, vol. 99, p. 043632, Apr 2019.
- [15] E. P. Gross, “Structure of a quantized vortex in boson systems,” *Nuovo Cimento*, vol. 20, pp. 454–477, Oct 1960.
- [16] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G. V. Shlyapnikov, and M. Lewenstein, “Dark solitons in Bose-Einstein condensates,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 83, pp. 5198–5201, Dec 1999.
- [17] C. Becker, S. Stellmer, P. Soltan-Panahi, S. Dörscher, M. Baumert, E.-M. Richter, J. Kronjäger, K. Bongs, and K. Sengstock, “Oscillations and interactions of dark and dark-bright solitons in Bose-Einstein condensates,” *Nat. Phys.*, vol. 4, pp. 496–501, Jun 2008.

- [18] E. H. Lieb and W. Liniger, “Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state,” *Phys. Rev.*, vol. 130, pp. 1605–1616, May 1963.
- [19] B. B. Baizakov, F. K. Abdullaev, B. A. Malomed, and M. Salerno, “Solitons in the Tonks–Girardeau gas with dipolar interactions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 42, p. 175302, aug 2009.
- [20] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, “Feshbach resonances in ultracold gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 1225–1286, Apr 2010.
- [21] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, and T. Pfau, “The physics of dipolar bosonic quantum gases,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 72, p. 126401, nov 2009.
- [22] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau, “Bose-einstein condensation of chromium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 160401, Apr 2005.
- [23] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn, and B. L. Lev, “Strongly dipolar bose-einstein condensate of dysprosium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 190401, Oct 2011.
- [24] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm, and F. Ferlaino, “Bose-Einstein Condensation of Erbium,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 210401, May 2012.
- [25] D. S. Petrov, “Quantum Mechanical Stabilization of a Collapsing Bose-Bose Mixture,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 115, p. 155302, Oct 2015.
- [26] H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, C. Wink, T. Maier, I. Ferrier-Barbut, and T. Pfau, “Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid,” *Nature*, vol. 530, pp. 194–197, Feb 2016.
- [27] I. Ferrier-Barbut, H. Kadau, M. Schmitt, M. Wenzel, and T. Pfau, “Observation of quantum droplets in a strongly dipolar bose gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, p. 215301, May 2016.
- [28] R. Ołdziejewski, W. Górecki, K. Pawłowski, and K. Rzazewski, “Strongly correlated quantum droplets in quasi-1D dipolar Bose gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 090401, Mar 2020.
- [29] L. Chomaz, S. Baier, D. Petter, M. J. Mark, F. Wächtler, L. Santos, and F. Ferlaino, “Quantum-Fluctuation-Driven Crossover from a Dilute Bose-Einstein Condensate to a Macrodroplet in a Dipolar Quantum Fluid,” *Phys. Rev. X*, vol. 6, p. 041039, Nov 2016.
- [30] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of Physics*, vol. 326, no. 1, pp. 96–192, 2011. January 2011 Special Issue.
- [31] S. Sinha and L. Santos, “Cold dipolar gases in quasi-one-dimensional geometries,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 140406, Oct 2007.
- [32] M. Girardeau, “Relationship between systems of impenetrable bosons and fermions in one dimension,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 1, no. 6, pp. 516–523, 1960.
- [33] E. H. Lieb, “Exact analysis of an interacting Bose gas. II. The excitation spectrum,” *Phys. Rev.*, vol. 130, pp. 1616–1624, May 1963.
- [34] P. Kościuk and T. Sowiński, “Exactly solvable model of two trapped quantum particles interacting via finite-range soft-core interactions,” *Sci. Rep.*, vol. 8, pp. 1–11, Jan 2018.
- [35] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 69, pp. 2863–2866, Nov 1992.

- [36] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 77, pp. 259–315, Apr 2005.
- [37] M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire, “The ITensor software library for tensor network calculations,” 2020.