



UNIwersytet w Białymstoku

Wydział Fizyki

PRACA DOKTORSKA

**Dynamika dwuskładnikowego
wzajemnie odpychającego się gazu
fermionów w skończonej
temperaturze**

Jarosław RYSZKIEWICZ

Promotor:

Dr hab. Tomasz KARPIUK prof. UwB

22 grudnia 2022

Podziękowania

Kieruję podziękowania do mojego promotora dr hab. Tomasza Karpiuka prof. UwB oraz prof. dr hab. Mirosława Brewczyka za opiekę naukową, życzliwość i poświęcony mi czas, które przyczyniły się do powstania tej pracy. Specjalne podziękowania składam mojej żonie Kasi za wyrozumiałość i wspieranie mnie w tej drodze.

Spis treści

Podziękowania	iii
1 Wstęp	1
2 Ferromagnetyzm	3
2.1 Pasmowy model ferromagnetyzmu	3
2.2 Niestabilność Stonera	5
3 Doświadczenie	7
3.1 Opis doświadczenia	7
3.2 Wyniki	8
4 Model orbitalowy	11
4.1 Teoria	11
4.1.1 Zerowa temperatura	11
4.1.2 Skończona temperatura	15
4.2 Wyniki numeryczne	17
5 Model hydrodynamiczny	25
5.1 Teoria	25
5.2 Wyniki numeryczne	29
5.2.1 Oscylacje spin-dipolowe	29
5.2.2 Oscylacje słabo oddziałującej odpychającej się miesza- niny fermionów	36
6 Podsumowanie	41

Spis rysunków

3.1	Schematyczny obraz doświadczenia.	8
3.2	Wykres częstotliwości spin-dipolowych w dwóch temperaturach $T/T_F = 0.12$ i $T/T_F = 0.25$ wyznaczone doświadczalnie.	9
3.3	Wykres fazowy.	10
4.1	Wykres częstotliwości modu spin-dipolowego w temperaturze $T = 0K$	14
4.2	Rozkład Fermiego-Diraca w temperaturze $T = 0K$	15
4.3	Rozkład Fermiego-Diraca w temperaturze $T \neq 0K$	16
4.4	Oscylacje spin-dipolowe dla rosnącej siły oddziaływania w temperaturze $T/T_F = 0.4$	18
4.5	Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 0.6733$	19
4.6	Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 2.693224$	19
4.7	Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 0.6733$ i dopasowana funkcja $f(t)$	20
4.8	Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 2.693224$ i dopasowana funkcja $f(t)$	20
4.9	Wykres częstotliwości modu spin-dipolowego dla różnych temperatur.	21
4.10	Tłumienie modu spin-dipolowego w różnych temperaturach.	22
4.11	Diagram fazowy - wyniki numeryczne spin-orbitali.	23
5.1	Częstotliwości modu spin-dipolowego w temperaturze $T/T_F = 0.12$	30
5.2	Częstotliwości modu spin-dipolowego w temperaturze $T/T_F = 0.25$	31
5.3	Rozkład gęstości atomów o przeciwnych spinach w płaszczyźnie XZ.	32
5.4	Rozkład gęstości atomów o przeciwnych spinach w płaszczyźnie XZ.	32
5.5	Tłumienie modu spin-dipolowego w różnych temperaturach dla dwóch liczb atomów $N/2 = 1000$ i $N/2 = 50000$	33
5.6	Częstotliwości modu spin-dipolowego w różnych temperaturach.	34
5.7	Diagram fazowy - wyniki numeryczne modelu hydrodynamicznego.	35
5.8	Częstotliwości monopolowego modu w różnych temperaturach dla dwóch liczb atomów.	36

5.9	Częstotliwości monopolowego modu w różnych temperaturach.	37
5.10	Częstotliwości monopolowego modu nieoddziałującego gazu w funkcji temperatury.	39

*Dedykuje tę pracę Kasi, Zosi, Eli i Heniowi oraz
wszystkim, którzy mnie wspierali w tej podróży.*

Rozdział 1

Wstęp

Ze zjawiskami magnetycznymi mamy do czynienia zarówno w świecie nauki jak i w życiu codziennym. Spotykamy się z nimi na co dzień używając wszelkiego rodzaju urządzeń zawierających silniki elektryczne czy też słuchając muzyki w odtwarzaczach muzycznych. W ferromagnetykach wędrownych, takich jak żelazo czy nikiel, spiny elektronów ustawiają się w jednym kierunku tworząc stan o niezerowej magnetyzacji. Elektrony te nie są zlokalizowane, ich funkcje falowe przekrywają się tak jak funkcje falowe elektronów z pasma przewodnictwa. Zjawiska ferromagnetyzmu nie potrafiono wyjaśnić w ramach fizyki klasycznej. Wyjaśnienie w postaci opisu w języku spinów, oddziaływania wymiany i zakazu Pauliego było sukcesem mechaniki kwantowej [4]. Jednakże nowo powstała teoria miała problem z opisem rzeczywistych materiałów. Po pierwsze uproszczone modele nie były w stanie opisać skomplikowanych układów, po drugie narzędzia teoretyczne pozwalające na obliczenia i analizę silnie skorelowanych atomów miały dopiero powstać. Jednak te proste modele badane w początkach mechaniki kwantowej okazały się doskonałymi narzędziami do opisu zachowania ultrazimnych fermionów, które zaczęto badać doświadczalnie po 1995 roku, kiedy to po raz pierwszy w historii otrzymano ultrazimne gazy kwantowe - kondensat Bosego-Einsteina [1], [8]. W 2001 roku Cornell, Ketterle i Wieman otrzymali nagrodę Nobla za uzyskanie kondensatu Bosego-Einsteina w rozrzedzonym gazie alkalicznych atomów. Uzyskanie ultrazimnego gazu atomów fermionowych wymagało użycia specjalnej techniki chłodzenia tzn. „chłodzenia sympatycznego”. Technika ta służy do chłodzenia jonów i atomów, których nie można schłodzić bezpośrednio przez chłodzenie laserowe. Jony atomowe, które mogą być bezpośrednio chłodzone laserem, są używane do chłodzenia sąsiednich jonów lub atomów, poprzez ich wzajemne zderzenia [23]. Ultrazimny gaz atomów fermionowych uzyskano w 1999 roku [9]. W doświadczeniach używa się rozrzedzonych, swobodnych atomów fermionowych, które oddziałują jedynie poprzez proste zderzenia. Gdy odpychanie staje się wystarczająco silne, atomy o przeciwnych spinach zaczynają się separować, tworząc domeny magnetyczne. To zjawisko, zwane niestabilnością Stonera przewidziane teoretycznie w latach 30 XX wieku [34] zostało zrealizowane doświadczalnie w 2016 roku [37].

Celem rozprawy doktorskiej było znalezienie modelu teoretycznego opisującego dynamikę ultrazimnych atomów, który to model pokazywałby istnienie niestabilności Stonera i dawałby wyniki zgodne z doświadczeniem [37].

W kolejnym rozdziale przedstawiony został opis ferromagnetyzmu w modelu pasmowym w kontekście fizyki ciała stałego oraz model wariacyjny opisujący niestabilność Stonera, czyli przejście z fazy paramagnetycznej do fazy ferromagnetycznej. W rozdziale 3 znajduje się opis doświadczenia [37], w którym badano dynamikę oraz stabilność dwóch chmur ultrazimnych atomów ${}^6\text{Li}$ zamkniętych w pułapce harmoniczej. Wykazało ono istnienie przejścia fazowego ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego wraz ze wzrostem siły oddziaływania pomiędzy atomami o przeciwnych spinach. W rozdziale 4 przedstawiony został model orbitalowy [32], metody obliczeniowe oraz porównanie otrzymanych wyników symulacji numerycznej i danych doświadczalnych [37]. W rozdziale 5 przedstawiony został model hydrodynamiczny [31], metody obliczeniowe oraz porównanie otrzymanych wyników symulacji numerycznej oscylacji spin-dipolowych i danych doświadczalnych [37], a także wyniki symulacji numerycznej małych drgań. Rozdział 6 zawiera podsumowanie wyników z rozdziału 4 i 5, które zostały uzyskane w ramach projektu **Dynamiczna niestabilność Stonera** 2018/29/B/ST2/01308 sfinansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.

Rozdział 2

Ferromagnetyzm

W tym rozdziale przedstawiony zostanie pasmowy model ferromagnetyzmu, który powstał w kontekście fizyki ciała stałego. Opis bazuje na podręczniku do fizyki ciała stałego [15]. Przedstawiony zostanie również model wariacyjny opisujący jednorodny odpychający się gaz zimnych atomów pokazujący niestabilność Stonera.

2.1 Pasmowy model ferromagnetyzmu

Zrenormalizowane energie elektronów o spinie \uparrow i \downarrow wynoszą odpowiednio:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow}(\mathbf{k}) &= E(\mathbf{k}) - \frac{In_{\uparrow}}{N}, \\ E_{\downarrow}(\mathbf{k}) &= E(\mathbf{k}) + \frac{In_{\downarrow}}{N}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

gdzie $E(\mathbf{k})$ to energie elektronów w normalnej jednoelektronowej strukturze pasmowej, n_{\uparrow} i n_{\downarrow} są liczbami elektronów o spinach \uparrow i \downarrow , a N jest liczbą wszystkich atomów. Parametr Stonera I to korelacyjna całka wymiany opisująca zmniejszenie energii związane z korelacją elektronów. Wprowadzamy parametr R :

$$R = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{N}, \quad (2.2)$$

który opisuje nadmiar elektronów o konkretnym spinie i z dokładnością do czynnika $\mu_B(N/V)$ (gdzie μ_B to magneton Bohra) jest równy namagnesowaniu. W celu uproszczenia od energii w przybliżeniu jednoelektronowym odejmiemy wielkość $I(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})/2N$. W ten sposób otrzymujemy:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow}(\mathbf{k}) &= \tilde{E}(\mathbf{k}) - \frac{IR}{2}, \\ E_{\downarrow}(\mathbf{k}) &= \tilde{E}(\mathbf{k}) + \frac{IR}{2}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

gdzie:

$$\tilde{E}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) - \frac{I(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})}{2N}. \quad (2.4)$$

Równania (2.3) opisują niezależne od \mathbf{k} rozszczepienie pasm energetycznych dla różnych spinów elektronów. Oczywiście niezależność od \mathbf{k} rozszczepienia wymiennego jest tylko przybliżeniem. Wielkość rozszczepienia zależy od R , czyli od względnego obsadzenia podpas. Obsadzenie podpas przez elektrony jest opisane statystyką Fermiego. Z warunku samouzgodnienia otrzymujemy:

$$R = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp[(\tilde{E}(\mathbf{k}) - IR/2 - E_F)/kT] + 1} - \frac{1}{\exp[(\tilde{E}(\mathbf{k}) + IR/2 - E_F)/kT] + 1}. \quad (2.5)$$

Gdy R jest różne od 0 oznacza to istnienie momentu magnetycznego nawet bez zewnętrznego pola tzn. istnienie ferromagnetyzmu. Możemy znaleźć warunki kiedy równanie (2.5) daje niezerowe rozwiązania na R . W tym celu rozwijamy prawą stronę równania (2.5) dla małych R . Wiedząc, że:

$$f\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right) - f\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) = -f'(x)\Delta x - \frac{2}{3!} \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 f'''(x), \quad (2.6)$$

otrzymujemy:

$$R = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \tilde{E}(\mathbf{k})} IR - \frac{1}{24} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^3 f(\mathbf{k})}{\partial \tilde{E}(\mathbf{k})^3} (IR)^3. \quad (2.7)$$

W równaniu (2.7) pierwsza pochodna funkcji Fermiego jest ujemna, a trzecia pochodna jest dodatnia. Warunkiem aby $R > 0$ czyli warunkiem istnienia ferromagnetyzmu jest:

$$-1 - \frac{I}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \tilde{E}(\mathbf{k})} > 0. \quad (2.8)$$

Największą wartość pochodna funkcji Fermiego $-\partial f/\partial \tilde{E}$ ma dla $T \rightarrow 0$. Warunek (2.8) najłatwiej spełnić dla temperatury $T = 0$. Przeprowadzenie sumowania po wszystkich wartościach \mathbf{k} jest w tym przypadku proste:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \tilde{E}(\mathbf{k})} &= \frac{V}{(2\pi)^3 N} \int \left(-\frac{\partial f}{\partial \tilde{E}}\right) d\mathbf{k} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N} \int \delta(\tilde{E} - E_F) d\mathbf{k} = \frac{1}{2} \frac{V}{N} D(E_F). \end{aligned} \quad (2.9)$$

W obliczeniach został uwzględniony fakt, że w temperaturze $T = 0$ funkcja Fermiego jest schodkiem. Pierwsza pochodna $-\partial f/\partial \tilde{E}$ jest funkcją $\delta(\tilde{E} - E_F)$. Zgodnie z równaniami (2.5) i (2.7) suma po \mathbf{k} oraz całka po elektronach jest brana tylko dla jednego rzutu spinu, natomiast w definicji gęstości stanów bierze się pod uwagę liczbę elektronów o spinach \uparrow i \downarrow w jednostce objętości. Suma jest więc równa połowie gęstości stanów dla elektronów na poziomie

Fermiego, stąd w równaniu (2.9) pojawia się współczynnik $1/2$. Gęstość stanów na atom i spin definiujemy jako:

$$\tilde{D}(E_F) = \frac{V}{2N} D(E_F). \quad (2.10)$$

Warunkiem istnienia ferromagnetyzmu jest więc:

$$I\tilde{D}(E_F) > 1. \quad (2.11)$$

Jest to warunek Stonera istnienia ferromagnetyzmu [15].

2.2 Niestabilność Stonera

Rozważamy jednorodny dwuskładnikowy gaz zimnych atomów będących fermionami, w którym oba rodzaje fermionów wzajemnie się odpychają. W teorii funkcjonału gęstości funkcjonały energii kinetycznej i energii oddziaływania wynoszą odpowiednio:

$$E_{kin}[n_{\pm}] = c_3 \int d^3\mathbf{r} n_{\pm}^{\frac{5}{3}}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

gdzie:

$$c_3 = \frac{6^{\frac{5}{3}} \pi^{\frac{4}{3}} \hbar^2}{20m} \quad (2.13)$$

i

$$E_{int}[n_+, n_-] = g \int d^3\mathbf{r} n_+(\mathbf{r}) n_-(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

gdzie:

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a. \quad (2.15)$$

Ponieważ gaz jest jednorodny i w każdym składniku jest taka sama liczba atomów to mamy:

$$n_+(\mathbf{r}) = n_-(\mathbf{r}) = n(\mathbf{r}) = const. \quad (2.16)$$

Energie kinetyczna i oddziaływania wynoszą odpowiednio:

$$E_{kin}[n] = c_3 n^{\frac{5}{3}} V, \quad (2.17)$$

$$E_{int}[n] = gn^2 V. \quad (2.18)$$

Wiedząc, że energia Fermiego wynosi:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}, \quad (2.19)$$

wyliczamy liczbę falową Fermiego:

$$k_F = (6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.20)$$

Porównując energię kinetyczną i energię oddziaływania definiujemy a_0 :

$$E_{kin}[n] = E_{int}[n] \Rightarrow k_F a = \frac{9}{20}\pi \equiv k_F a_0. \quad (2.21)$$

Następnie zakładamy, że gęstości nie muszą być równe:

$$\rho = n_+ + n_- = xn + (2-x)n \quad ; \quad x \in [0, 2]. \quad (2.22)$$

Energia całkowita wynosi:

$$E_c = E_{kin}[n_+] + E_{kin}[n_-] + E_{int}[n_+, n_-]. \quad (2.23)$$

Zapisując energię całkowitą w jednostkach energii kinetycznej otrzymujemy:

$$\frac{E_c}{E_{kin}} = x^{\frac{5}{3}} + (2-x)^{\frac{5}{3}} + \alpha x(2-x), \quad (2.24)$$

gdzie $\alpha = a/a_0$. Szukamy minimum energii całkowitej ze względu na x przy różnych wartościach α . Kiedy wartość α jest mniejsza niż krytyczna, minimum energii występuje dla $x = 1$, czyli kiedy liczba atomów w każdym składniku jest taka sama. Kiedy wartość α jest większa niż krytyczna minimum energii występuje dla $x \rightarrow 0$ lub $x \rightarrow 2$, a więc wszystkie atomy są w jednym składniku czyli mamy domenę. Znajdujemy krytyczną wartość oddziaływania, przy której następuje przejście z fazy paramagnetycznej do fazy ferromagnetycznej:

$$\alpha_{kr} = \frac{10}{9} \Rightarrow k_F a_{kr} = \frac{1}{2}\pi. \quad (2.25)$$

Rozdział 3

Doświadczenie

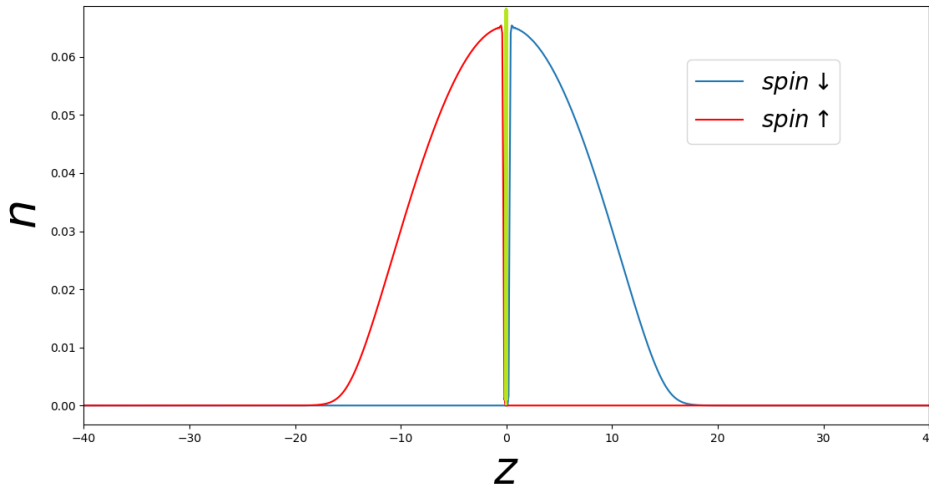
Doświadczenie [37] miało na celu udowodnienie istnienia przejścia fazowego ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego układu złożonego z dwuskładnikowego gazu Fermiego. Potwierdziło ono hipotezę wędrującego ferromagnetyzmu zaproponowaną przez E. Stonera [34] w zimnych gazach atomowych.

3.1 Opis doświadczenia

Na początku przygotowano dwie chmury ultrazimnych atomów ${}^6\text{Li}$ w dwóch najniższych stanach Zeemana. Każda chmura zawierała $N = 5 \cdot 10^4$ atomów. Atomy zostały uwięzione w pułapce w kształcie cygara, którego osiowa i radialne częstotliwości wynosiły odpowiednio $\nu_z = 2\pi \times 21 \text{ Hz}$ i $\nu_\perp = 2\pi \times 265 \text{ Hz}$. Poprzez dopasowanie procesu chłodzenia przez odparowanie możliwe było dostrojenie temperatury od $T/T_F < 0.1$ do ~ 1 , gdzie T jest temperaturą gazu, a T_F jest temperaturą Fermiego gazu (jednego ze składników) złożonego z N atomów w pułapce harmoniczej daną równaniem:

$$k_B T = E_F = h(6N\nu_z\nu_\perp^2)^{1/3}, \quad (3.1)$$

gdzie h to stała Plancka, a k_B to stała Boltzmanna. Po przyłożeniu gradientu pola magnetycznego składniki o przeciwnych spinach zostają rozseparowane przestrzennie wzdłuż osi z . Kiedy przekrywanie się chmur atomów o przeciwnych spinach jest praktycznie zerowe wprowadzana jest optyczna bariera grubości $2\mu\text{m}$ o wysokości $V_0 \sim 10E_F$ w środek pułapki harmoniczej w taki sposób, że dzieli tę pułapkę na dwa niezależne rezerwuary tak jak na rysunku 3.1. Następnie gradient pola magnetycznego zostaje adiabaticznie wyłączony. Zostają utworzone dwie makroskopowe statyczne domeny spinowe oddalone od siebie na odległość kilka razy szerszą niż średnia odległość między atomami gazu. Następnie usuwając optyczną barierę pozwolono chmurom atomów o przeciwnych spinach oddziaływać ze sobą. Przed usunięciem bariery siła oddziaływania pomiędzy atomami o przeciwnych spinach dostrajana była za pomocą ustawienia pola magnetycznego blisko środka szerokiego rezonansu Feshbacha $\uparrow - \downarrow$ wynoszącego ok. 832 G.



RYSUNEK 3.1: Schematyczny obraz doświadczenia.

3.2 Wyniki

W czasie dynamiki mierzona była odległość pomiędzy środkami mas obu chmur atomów o przeciwnych spinach:

$$d(t) = Z_{\downarrow}(t) - Z_{\uparrow}(t), \quad (3.2)$$

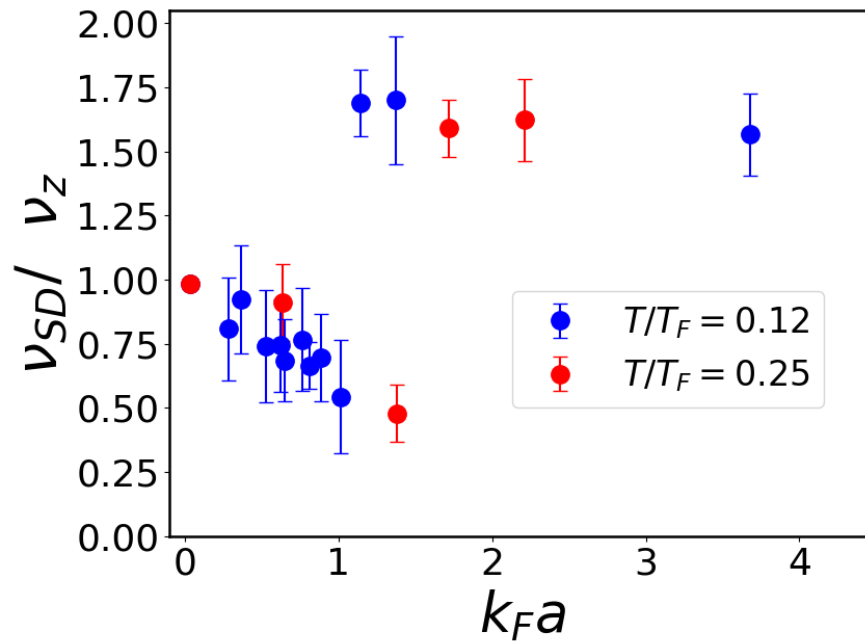
gdzie Z_{α} są środkami masy poszczególnych składników. Następnie dofitowano funkcję:

$$f(t) = A \cos(2\pi\nu_s t) e^{-t/\tau}, \quad (3.3)$$

aby wyznaczyć częstotliwości oscylacji spin-dipolowych czyli oscylacji odległości pomiędzy środkami mas chmur atomów o przeciwnych spinach. W ten sposób wyznaczono ν_{SD} dla dwóch temperatur $T/T_F = 0.12$ i $T/T_F = 0.25$. Wyniki przedstawia rysunek 3.2. Jak widzimy na wykresie kiedy układ jest w stanie paramagnetycznym wraz ze wzrostem siły oddziaływania ($k_F a$) częstotliwość oscylacji ulega zmniejszeniu - tzw. "zmiękczenie modu". Dzieje się tak do momentu osiągnięcia krytycznej wartości $k_F a$. Po przekroczeniu $(k_F a)_{kr}$ kiedy układ jest w stanie ferromagnetycznym częstotliwość oscylacji spin-dipolowych wzrasta do ok. $1.7\nu_z$. Oznacza to, że obie chmury atomów przestały się przenikać, a zaczęły się odbijać od siebie tworząc dwie domeny. Widzimy też, że wraz ze wzrostem temperatury moment przejścia ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego przesuwają się w prawo czyli $(k_F a)_{kr}$ rośnie wraz z temperaturą.

W drugiej części eksperymentu, aby wyznaczyć krytyczne $k_F a$ dla wyższych temperatur mierzono względną populację $i = \uparrow, \downarrow$ składników w lewym i prawym rezerwuarze:

$$M_i = \frac{N_{i,L} - N_{i,R}}{N_{i,L} + N_{i,R}}, \quad (3.4)$$



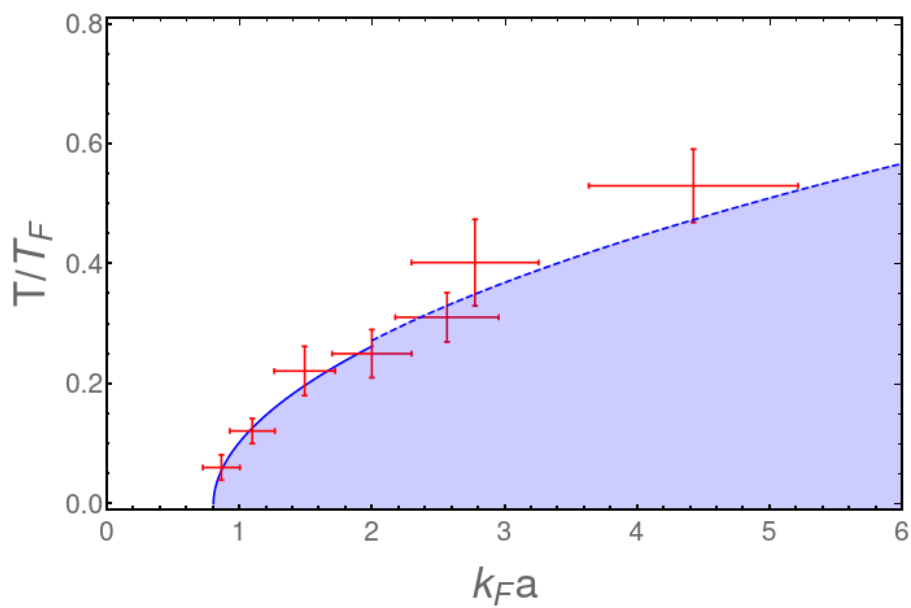
RYSUNEK 3.2: Wykres częstotliwości drgań spin-dipolowych ν_{SD} znormalizowany do częstotliwości osiowej pułapki ν_Z w funkcji $k_F a$ dla dwóch temperatur $T/T_F = 0.12$ niebieskie punkty i $T/T_F = 0.25$ czerwone punkty.

z której obliczano magnetyzację:

$$\Delta M = \frac{M_{\uparrow} - M_{\downarrow}}{2}. \quad (3.5)$$

Zachowanie $d(t)$ odzwierciedla zachowanie ΔM .

Wyniki tych dwóch analiz zostały zebrane na rysunku 3.3. Jest to wykres zależności wartości krytycznej $k_F a$ od temperatury. Linia ciągła to dofitowanie potęgowe do punktów dla temperatury $T/T_F < 0.3$, a linia przerywana to dofitowanie potęgowe do wszystkich punktów pomiarowych. Obszar pod liniami (szare tło) to obszar występowania metastabilnej fazy ferromagnetycznej. Magnetyzacja w tym obszarze utrzymuje się przez pewien czas (od kilku do kilkudziesięciu ms), a następnie zanika.



RYSUNEK 3.3: Metastabilny obszar występowania fazy ferromagnetycznej (szary obszar). Czerwone krzyże na wykresie przedstawiają krytyczną wartość $k_F a$ w poszczególnych temperaturach T/T_F . Linia ciągła to dofitowanie potęgowe do punktów $T/T_F < 0.3$, przerywana linia to rozszerzenie dofitowania o wszystkie punkty.

Rozdział 4

Model orbitalowy

W tym rozdziale przedstawiony zostanie model orbitalowy, który został użyty do opisu doświadczenia [37] w pierwszej kolejności. Na początku przedstawiony będzie opis w zerowej temperaturze, a następnie zostanie przedstawiony opis i wyniki numeryczne w skończonej temperaturze.

4.1 Teoria

4.1.1 Zerowa temperatura

Do modelowania doświadczenia [37] zostało użyte przybliżenie Hartree-Fock'a, które było już używane do analizowania różnych mieszanin zimnych atomów [17], [19], [16], [11], [32]. Każdy fermion opisany jest jednocząstkową funkcją falową:

$$\phi_i(j) = \begin{bmatrix} \phi_i(1, \mathbf{r}_j, t) \\ \phi_i(2, \mathbf{r}_j, t) \\ \dots \\ \phi_i(s, \mathbf{r}_j, t) \end{bmatrix}. \quad (4.1)$$

Ta funkcja falowa zwana spin-orbitalem atomowym zależy od położenia i spinu. Następnie wielociałowa funkcja falowa układu N nierozróżnialnych fermionów może być przybliżona poprzez wyznacznik Slatera:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\mathbf{x}_1) & \dots & \phi_1(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N(\mathbf{x}_1) & \dots & \phi_N(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (4.2)$$

Współrzędne \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, N$) zawierają przestrzenne i spinowe zmienne, a $\phi_i(\mathbf{x})$ ($i = 1, \dots, N$) to ortonormalne spin-orbitale.

Równania ruchu na spin-orbitale można wyprowadzić używając formalizmu

Lagrange'a. Poniższa gęstość Lagrangianu prowadzi do wielociałowego równania Schrödingera:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i\hbar}{2} \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} \right) \Psi - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i \Psi^\dagger \nabla_i \Psi \\ & - \sum_{i=1}^N \Psi^\dagger V_{ext}(\mathbf{r}_i) \Psi - \sum_{i<j} \Psi^\dagger V_{int}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Psi. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Funkcja Lagrange'a wynosi:

$$L = \int \mathcal{L} d^3r_1 d^3r_2 \cdots d^3r_N. \quad (4.4)$$

Działanie S jest zdefiniowane następująco:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt. \quad (4.5)$$

Aby wyprowadzić równania ruchu korzystamy z zasady najmniejszego działania:

$$0 = \delta S = \sum_i \left[\frac{\partial S}{\partial \phi_i^*(s_j, \mathbf{r}_j, t)} \delta \phi_i^*(s_j, \mathbf{r}_j, t) + \frac{\partial S}{\partial \phi_i(s_j, \mathbf{r}_j, t)} \delta \phi_i(s_j, \mathbf{r}_j, t) \right]. \quad (4.6)$$

Wariacje po $\phi_i^*(s_j, \mathbf{r}_j, t)$ i $\phi_i(s_j, \mathbf{r}_j, t)$ są niezależne. Wariując po $\phi_i^*(s_j, \mathbf{r}_j, t)$ otrzymujemy równania Hartree-Focka:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_i(c, \mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(c, \mathbf{r}, t) + \quad (4.7)$$

$$+ \sum_{k=1}^N \sum_{c'=1}^s \int d^3r' [\phi_i(c, \mathbf{r}, t) V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_k^*(c', \mathbf{r}', t) \phi_k(c', \mathbf{r}', t) - \quad (4.8)$$

$$- \phi_k(c, \mathbf{r}, t) V_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_k^*(c', \mathbf{r}', t) \phi_i(c', \mathbf{r}', t)]; \quad (4.9)$$

$i = 1, 2, \dots, N$ i $c = 1, 2, \dots, s$, gdzie N jest liczbą atomów, a s jest liczbą składników spinowych. Rozważamy dwuskładnikowy gaz Fermiego, czyli spinowa zmienna spin-orbitalu może przyjmować dwie wartości:

$$\phi_i^+(\mathbf{r}, t), \quad (4.10)$$

dla spinu \uparrow i

$$\phi_i^-(\mathbf{r}, t), \quad (4.11)$$

dla spinu \downarrow . Tak jak w eksperymencie [37] przyjmujemy mieszaninę jednakowych ilości dwóch składników o różnych spinach. Fermiony o tym samym spinie nie oddziałują ze sobą:

$$V_{int}^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_{int}^{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0. \quad (4.12)$$

Rozważamy tylko oddziaływanie w postaci odpychania się atomów o przeciwnych spinach:

$$V_{int}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.13)$$

W niskich temperaturach w wielu przypadkach oddziaływanie to może być dobrze opisane za pomocą potencjału kontaktowego zależnego od stałej g , która jest powiązana z długością rozpraszania a fali s poprzez $g = 4\pi\hbar^2 a/m$. Zależne od czasu równanie Hartree-Fock'a na spin-orbitale $\phi_i^+(\mathbf{r}, t)$ i $\phi_i^-(\mathbf{r}, t)$ jest następujące:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_i^\pm(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}_{sp} \phi_i^\pm(\mathbf{r}, t), \quad (4.14)$$

gdzie $i = 1, \dots, N/2$. Jednocząstkowy Hamiltonian dany jest równaniem:

$$\mathcal{H}_{sp} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{tr}(\mathbf{r}) + g n_{\mp}(\mathbf{r}, t), \quad (4.15)$$

gdzie $n_+(\mathbf{r}, t)$ i $n_-(\mathbf{r}, t)$ to atomowe gęstości chmur o przeciwnych spinach (normalizowane do ilości atomów każdego ze składników) zdefiniowane jako:

$$n_{\pm}(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{N/2} |\phi_n^\pm(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (4.16)$$

Aby uzyskać zgodność ilościową z wynikami eksperymentu [37] uproszczony opis oddziaływania musi zostać ulepszony. Musimy uwzględnić w oddziaływaniu wielociałowe korelacje. Możemy to zrobić poprzez modyfikację wielociałowej funkcji falowej (4.2) poprzez dodanie czynnika korelacji Jastrowa. Metoda Monte Carlo z próbną funkcją falową w postaci Jastrow-Slater była już z sukcesem stosowana do mieszanin zdegenerowanych gazów [29], [3]. Zauważyć trzeba, że istnieje prostsze przybliżenie metoda wariacyjna najniższego rzędu [24], [25], [27], która była używana do otrzymania dobrego przybliżenia wyników metody Monte Carlo [7], [26]. Innym sposobem uwzględnienia korelacji jest wprowadzenie efektywnego oddziaływania. Zostało to już zaproponowane w pracy [11], gdzie były badane spin-dipolowe oscylacje dwuskładnikowego gazu Fermiego w zerowej temperaturze oraz w pracach [32], [31] w skończonych temperaturach. Zrenormalizowana długość rozpraszania wynosi:

$$a_{eff} = \left[\frac{\zeta(k_1 a)}{k_1} + \frac{\zeta(k_2 a)}{k_2} \right] / 2. \quad (4.17)$$

Rozwinięcie zrenormalizowanej funkcji w potęgach $k_F a$ jest następujące:

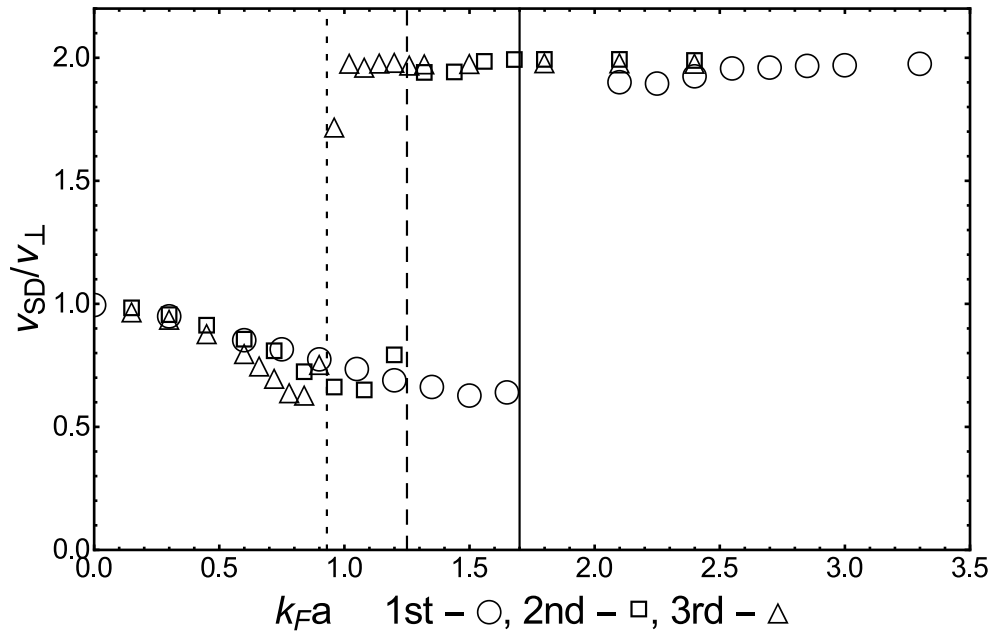
$$\zeta(k_F a) = k_F a + A(k_F a)^2 + D(k_F a)^3 + \dots, \quad (4.18)$$

gdzie $A = 6(11 - 2 \ln 2)/35\pi$, $D = 1.084$. Pierwszy element rozwinięcia w równaniu (4.18) to długość rozpraszania dla dwóch swobodnych cząstek. Drugi element rozwinięcia został po raz pierwszy wyznaczony przez Hunga i Yanga [14] oraz Lee i Yanga [21] dla pseudopotencjału $\delta(r) \frac{\partial}{\partial r}(r)$. Trzeci

element rozwinięcia zależy od międzyatomowego potencjału i zawiera trójciałowe korelacje. Znormalizowane równanie Hartree-Focka jest następujące:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_i^{\pm}(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{tr}(\mathbf{r}) + g n_{\mp}(\mathbf{r}, t) + B \left(\frac{4}{3} n_{\pm}^{1/3}(\mathbf{r}, t) n_{\mp}(\mathbf{r}, t) + n_{\mp}^{4/3}(\mathbf{r}, t) \right) + E \left(\frac{5}{3} n_{\pm}^{2/3}(\mathbf{r}, t) n_{\mp}(\mathbf{r}, t) + n_{\mp}^{5/3}(\mathbf{r}, t) \right) \right] \varphi_i^{(\pm)}(\mathbf{r}, t), \quad (4.19)$$

gdzie $i = 1, \dots, N/2$, $E = g a^2 D (6\pi^2)^{2/3} / 2$, $B = (4\pi\hbar^2/m) a^2 A (6\pi^2)^{1/3} / 2$. Rysunek 4.1, który pochodzi z pracy [11] przedstawia wyniki numeryczne oscylacji spin-dipolowych po uwzględnieniu kolejnych rzędów poprawek do oddziaływania. Krytyczna wartość $k_F a$ dla przypadku kiedy oddziaływanie nie jest znormalizowane (pionowa ciągła linia na wykresie) jest zgodna z otrzymaną z rachunku wariacyjnego $k_F a_{kr} = \frac{1}{2}\pi$ - równanie (2.25). Można zauważyć, że wprowadzanie kolejnych poprawek do oddziaływania przesunęło wartość krytyczną $k_F a$, przy której następuje przejście ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego w kierunku wartości 0.9 co jest zgodne z wynikami eksperymentu [37].



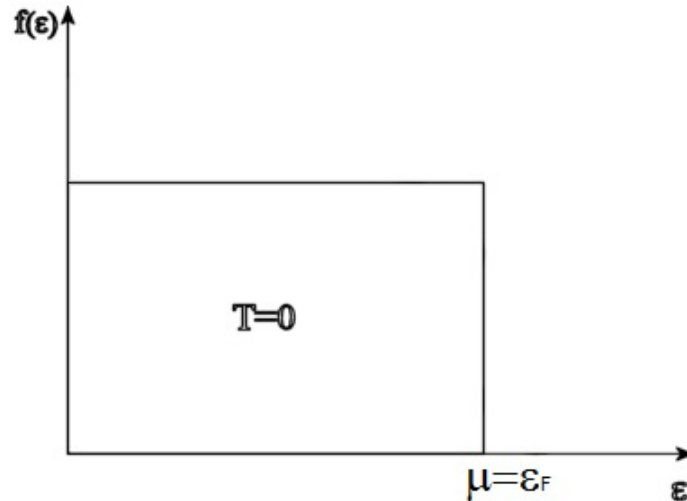
RYSUNEK 4.1: Wykres częstotliwości modu spin-dipolowego w temperaturze $T = 0K$ po uwzględnieniu kolejnych rzędów poprawek do oddziaływania [11].

4.1.2 Skończona temperatura

Zgodnie ze statystyką Fermiego-Diraca prawdopodobieństwo obsadzenia stanu o energii ε wynosi:

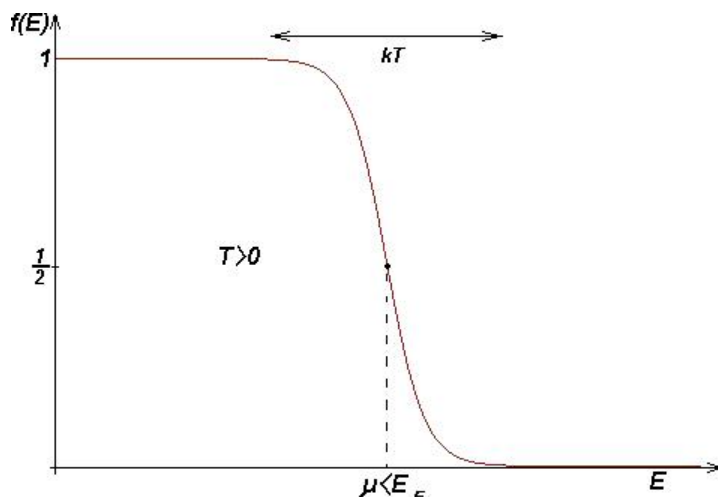
$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1}, \quad (4.20)$$

gdzie: T to temperatura, k_B to stała Boltzmannna, a μ to potencjał chemiczny. W temperaturze 0K prawdopodobieństwo obsadzenia stanu o energii mniejszej



RYSUNEK 4.2: Rozkład Fermiego-Diraca w temperaturze $T = 0K$.

szej od ε_F ($\mu(0) = \varepsilon_F$) wynosi jeden, czyli wszystkie stany do energii Fermiego są obsadzone (rysunek 4.2). W skończonej temperaturze prawdopodobieństwo obsadzenia stanów o energii mniejszej od μ staje się mniejsze niż jeden, a prawdopodobieństwo obsadzenia stanów o energii większej niż μ staje się skończone. Oznacza to, że w konkretnej realizacji niektóre stany o energii mniejszej od μ pozostają nieobsadzone, natomiast zostają obsadzone stany o energii większej od μ (rysunek 4.3). Aby rozszerzyć analizę oscylacji spin-dipolowych dwuskładnikowego gazu Fermiego w temperaturach różnych od zera dopuszczamy w populacji jednocząstkowych stanów stany o energii większej od energii Fermiego. Pomimo tego, że równanie (4.14) zawiera składnik odpowiadający za oddziaływanie odpychające pomiędzy atomami o przeciwnych spinach to stan początkowy dwuskładnikowego gazu Fermiego nie zawiera oddziaływania. Jest tak ponieważ początkowo chmury atomów o przeciwnych spinach są przestrzennie rozseparowane tak samo jak w eksperymencie [37]. Dopóki ultrazimne spolaryzowane fermionowe atomy nie oddziałują, uzasadnione jest wygenerowanie wielkiego zespołu kanonicznego stanów dwuskładnikowego gazu Fermiego, który odpowiada stanowi początkowemu mającemu poziomy energii i ich populację jak gaz doskonały. Następnie prawdopodobieństwo obsadzenia jednocząstkowego stanu ϕ_n o energii ε_n jest zgodnie z rozkładem



RYSUNEK 4.3: Rozkład Fermiego-Diraca w temperaturze $T \neq 0K$.

Fermiego-Diraca dane równaniem (4.20). Generujemy zgodnie z tym prawdopodobieństwem konfiguracje stanów dla obydwu składników w różnych temperaturach. Technicznie rzecz biorąc bierzemy po kolei wszystkie stany, obliczamy ich prawdopodobieństwo i przyrównujemy je do wygenerowanej dla każdego stanu losowej liczby r z przedziału $[0, 1]$. Jeżeli $r < p_n$, to dany stan jest uwzględniany w danej konfiguracji. Liczba atomów każdego ze składników może się nieznacznie różnić w poszczególnych konfiguracjach, ale średnio jest ich tyle samo pod warunkiem, że liczba konfiguracji jest odpowiednio duża. Żeby zastosować opisaną wyżej metodę potrzebujemy jeszcze wyznaczyć wartość potencjału chemicznego dla każdego fermionowego składnika. Potencjał chemiczny i temperatura to dwa parametry, które możemy zmieniać w wielkim zespole kanonicznym. Są one powiązane ze średnią liczbą atomów i średnią energią w zespole. Aby wyznaczyć potencjał chemiczny odpowiadający danej średniej liczbie atomów $\langle N \rangle$ w zadanej temperaturze musimy rozwiązać równanie:

$$\sum_{n=1}^{n_{max}} \frac{1}{e^{\frac{(\varepsilon_n - \mu)}{k_B T}} + 1} = \langle N \rangle.$$

Lewa strona równania to suma obsadzeń wszystkich rozważanych jedno-cząstkowych stanów. W tej analizie $\langle N \rangle = N/2 = 24$ dla każdego składnika, a liczba jedno-cząstkowych stanów, które są uwzględniane wynosi $n_{max} \approx 4 \times 10^3$. Potencjał chemiczny wyliczony w ten sposób jest zgodny z potencjałem chemicznym wyliczonym z niskotemperaturowego rozwinięcia Sommerfelda dla gazu w pułapce harmoniczej dla temperatur nieprzekraczających $0.55 T_F$ (T_F to temperatura Fermiego) [5]:

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]. \quad (4.21)$$

4.2 Wyniki numeryczne

Obliczenia numeryczne przeprowadzone zostały w Centrum Obliczeniowym Wydziału Fizyki UwB na Wydziałowym Klastrze Obliczeniowym. Wydziałowy Klast Obliczeniowy zbudowany jest z 22 jednostek obliczeniowych i jednego komputera dostępowego. Każdy serwer obliczeniowy to maszyna dwuprocessorowa oparta na procesorze Intel Xeon E5-2650v2 @2.6 GHz (8 rdzeni na procesor), wyposażona w 96 GB RAM oraz lokalny twardy dysk 3TB SATA 7200 rpm. Do obliczeń wykorzystanych było 9 jednostek obliczeniowych.

Symulacja oscylacji spin-dipolowych dla liczby atomów $N = 24 + 24$ prowadzona była na siatce $64 \times 64 \times 512$ z krokiem przestrzennym $dx = dy = dz = 0.075$. Długość ewolucji czasowej wynosiła 20 w jednostkach oscylatorowych, a krok czasowy $dt = 0.0005$. Rzeczywisty czas jednej ewolucji wynosił prawie 8 dni.

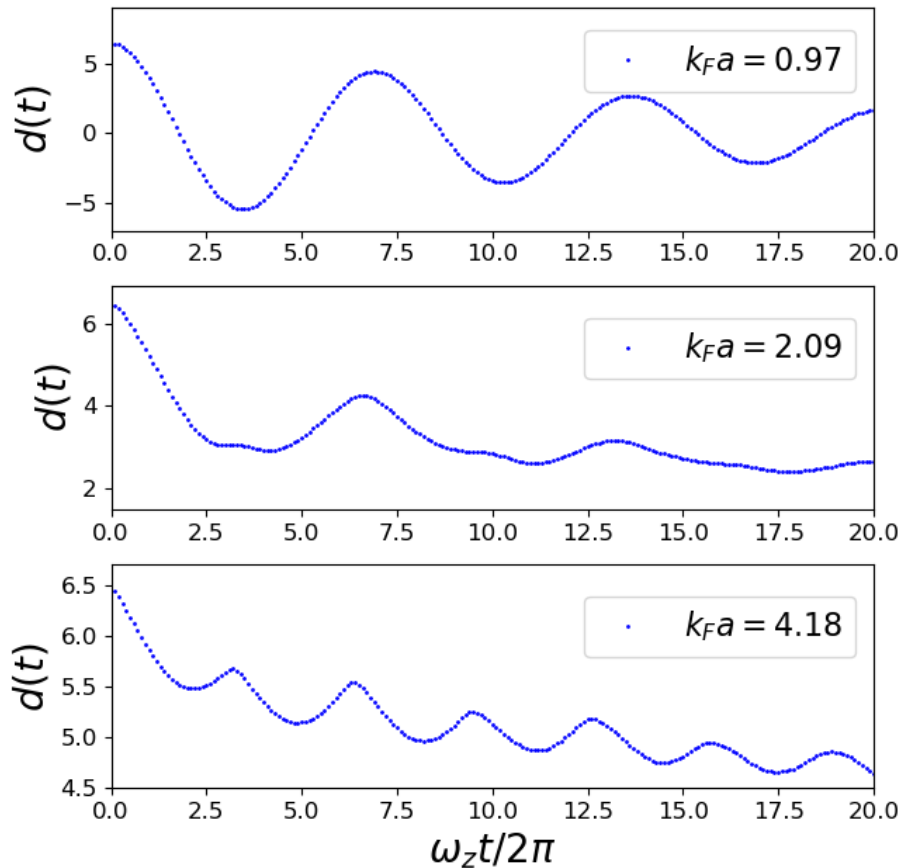
W zadanej temperaturze T i przy średniej liczbie atomów $N/2$ dla każdego ze składników przy pomocy rozkładu Fermiego-Diraca tworzymy wielocząstkowe stany gazu Fermiego dwóch chmur atomów o przeciwnych spinach. Następnie usuwamy rozdzielającą te chmury barierę i obserwujemy dynamikę tych atomów. Aby to zrobić rozwiązujemy numerycznie równanie (4.14) dla różnych temperatur i różnej siły oddziaływania $k_F a$, gdzie k_F to liczba falowa Fermiego, która wynosi:

$$k_F = \frac{(24N)^{1/6}}{a_{ho}}, \quad (4.22)$$

gdzie:

$$a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}} \right)^{1/2}, \quad (4.23)$$

a ω_{ho} to średnia geometryczna częstotliwości pułapki. Tak jak w eksperymencie [37], osiowa i radialne częstotliwości wynoszą odpowiednio $\omega_z = 2\pi \times 21$ Hz i $\omega_{\perp} = 2\pi \times 265$ Hz. Monitorujemy odległość $d(t)$ pomiędzy środkami mas tych dwóch chmur atomów jako funkcję czasu. Odległość $d(t)$ różni się pomiędzy różnymi konfiguracjami jednak wynik uśredniamy po 10 różnych konfiguracjach. Na rysunku 4.4 przedstawione jest średnie $d(t)$ w temperaturze $T/T_F = 0.4$ dla różnych wartości siły oddziaływania. Przedstawione zostały trzy jakościowo różne reżimy dynamiki tego układu. Dla małego i odpowiednio dużego $k_F a$ (odpowiednio górna i dolna ramka) $d(t)$ wyraźnie oscyluje. W okolicy przejścia oscylacje są mocno tłumione (środkowa ramka).



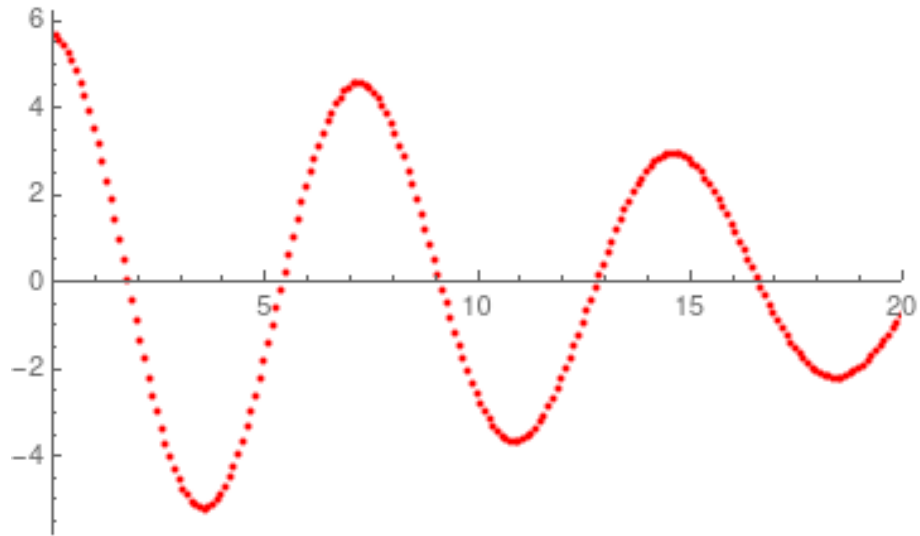
RYSUNEK 4.4: Spin-dipolowe oscylacje chmur atomów o przeciwnych spinach dla rosnącej siły oddziaływania $k_F a$ w temperaturze $T/T_F = 0.4$. Względna odległość $d(t)$ pomiędzy środkami mas tych chmur przedstawiona została jako funkcja czasu. Każda wartość $d(t)$ jest uśredniona po 10 konfiguracjach. Liczba atomów wynosi $N/2 = 24$.

Analiza danych takich jak na rysunku 4.4 została wykonana przy pomocy programu „Mathematica”. Plik wejściowy zawierał średnią odległość $d(t)$ między środkami masy dwóch chmur atomowych o przeciwnych spinach, która została przedstawiona na wykresie jako funkcja czasu. Rysunek 4.5 przedstawia dane wejściowe dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 0.6733$, a rysunek 4.6 przedstawia dane wejściowe dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 2.693224$. Następnie używając funkcji „NonlinearModelFit” dopasowano dane wejściowe do funkcji:

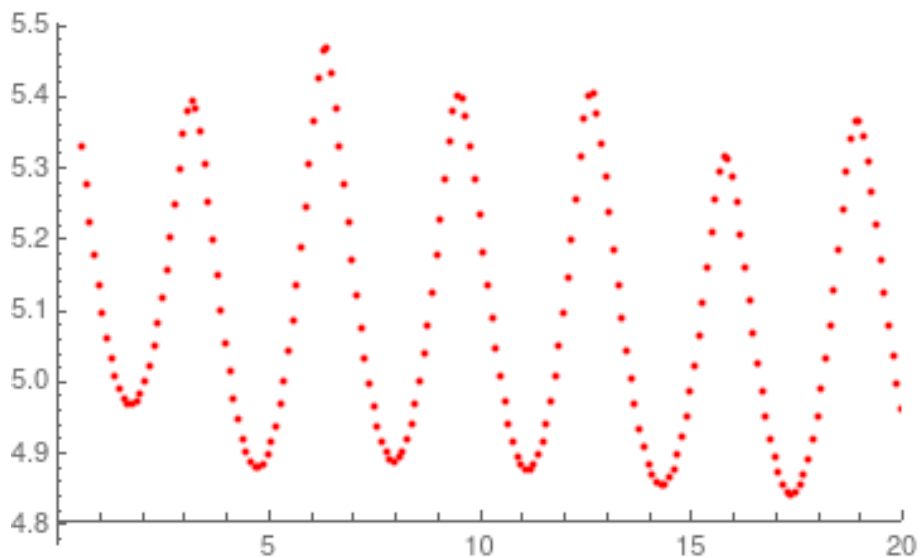
$$f(t) = c_0 + c_1 t + c_2 e^{-\Gamma t} \sin(\omega_{SD} t + \varphi). \quad (4.24)$$

Na rysunku 4.7 i 4.8 pokazane są dane wejściowe oraz funkcja $f(t)$ z wyznaczonymi z dopasowania parametrami $c_0, c_1, c_2, \Gamma, \omega_{SD}$ i φ .

Wyznaczone z dopasowania ω_{SD} i Γ przedstawione zostały jako funkcje

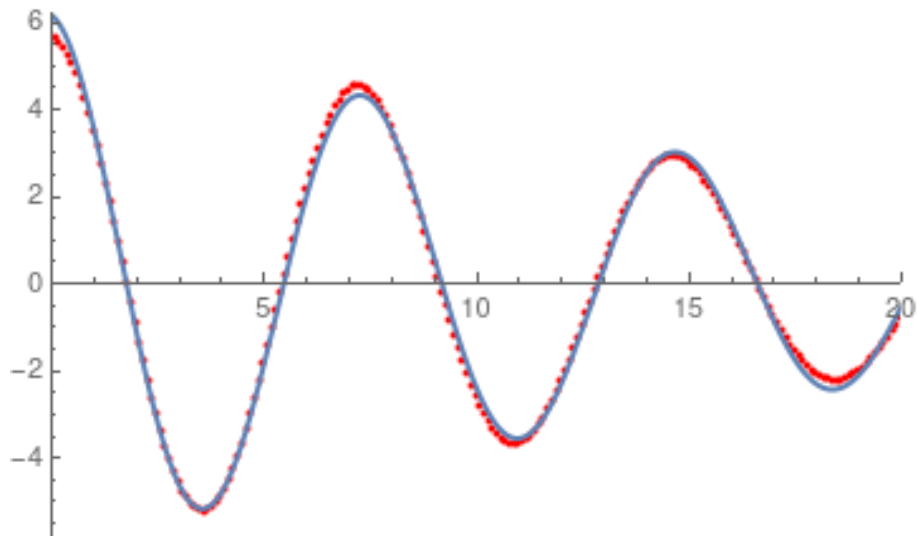


RYSUNEK 4.5: Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 0.6733$. Liczba atomów wynosi $N/2 = 24$.

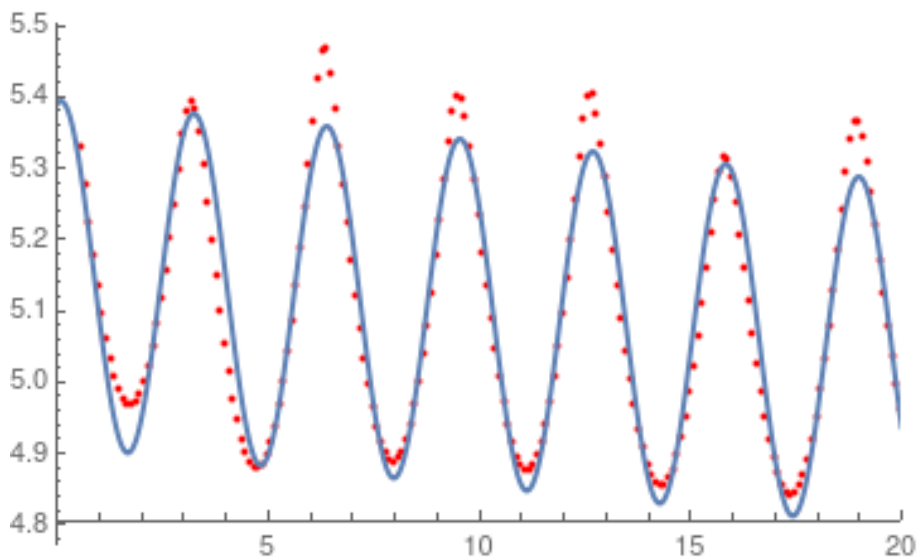


RYSUNEK 4.6: Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 2.693224$. Liczba atomów wynosi $N/2 = 24$.

$k_F a$ (rysunki 4.9 i 4.10). Dla niewielkiej siły odpychania dwie chmury atomów zachowują się jak przenikające się płyny. Kiedy nie występuje odpychanie pomiędzy chmurami, oscylują one z częstotliwością równą częstotliwości ω_z pułapki. Kiedy siła odpychania rośnie częstotliwość maleje do wartości $0.5\omega_z$ w zerowej temperaturze [11]. Nazywa się to efektem „zmiękczenia modu” i dla wyższych temperatur ulega on osłabieniu (rysunek 4.9). Kiedy siła odpychania rośnie dalej obserwujemy jakościowo zmianę odpowiedzi układu. Dwie chmury atomów stają się nieprzenikalne. Dla temperatur do $T/T_F = 0.4$ chmury atomów oscylują z częstotliwością poniżej $2\omega_z$

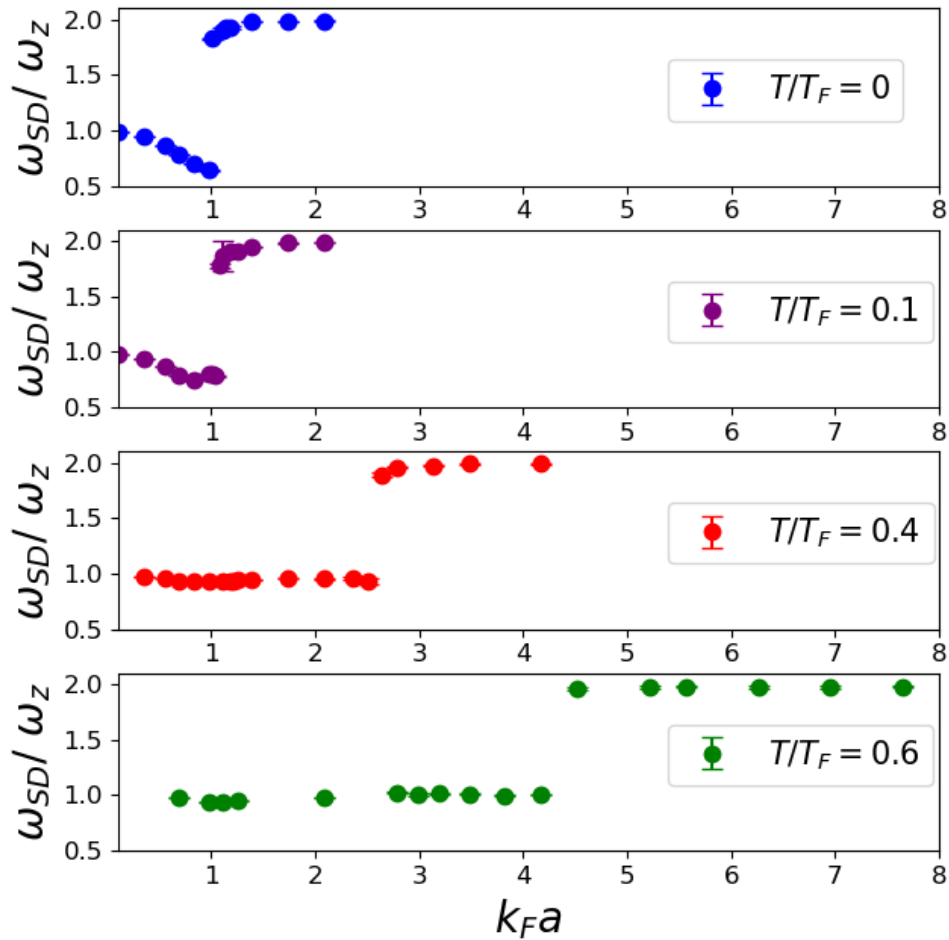


RYSUNEK 4.7: Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 0.6733$ oraz funkcja $f(t)$ z wyznaczonymi z dopasowania parametrami. Liczba atomów wynosi $N/2 = 24$.



RYSUNEK 4.8: Wykres średniej odległości $d(t)$ jako funkcji czasu dla temperatury $T/T_F = 0.2$ i $k_F a = 2.693224$ oraz funkcja $f(t)$ z wyznaczonymi z dopasowania parametrami. Liczba atomów wynosi $N/2 = 24$.

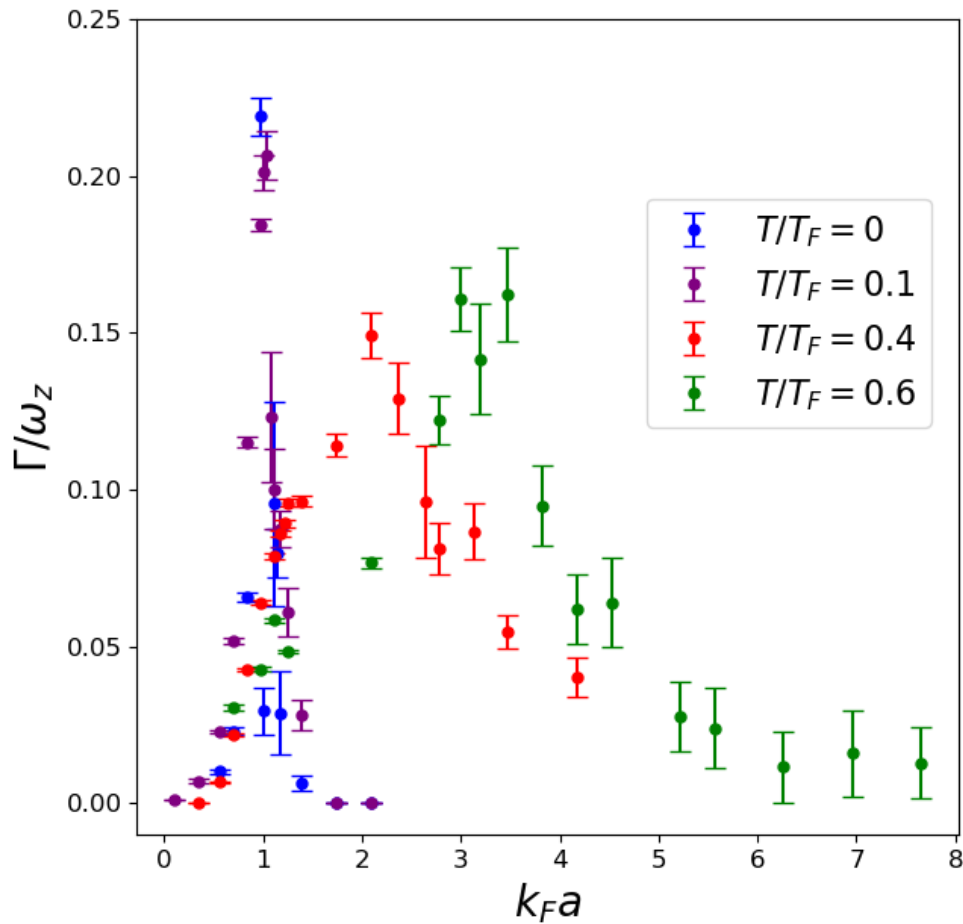
zaraz po przejściu przez krytyczną wartość $k_F a$. Następnie częstotliwość rośnie do blisko podwójnej ω_z częstotliwości pułapki dla większych wartości $k_F a$. Krytyczna wartość $k_F a$ rośnie wraz ze wzrostem temperatury. Można to wyjaśnić modelem Stonera wędrującego ferromagnetyzmu. W tym modelu odpychanie pomiędzy fermionami równoważy ciśnienie kwantowe. Ponieważ ciśnienie Fermiego doskonałego gazu rośnie wraz z temperaturą [13], potrzebne jest silniejsze odpychanie aby zrównoważyć ciśnienie.



RYSUNEK 4.9: Częstotliwości modu spin-dipolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego jako funkcja $k_F a$ dla różnych temperatur. Wyższa temperatura utrudnia powstawanie fazy ferromagnetycznej, dlatego separacja składników zachodzi dla większych $k_F a$.

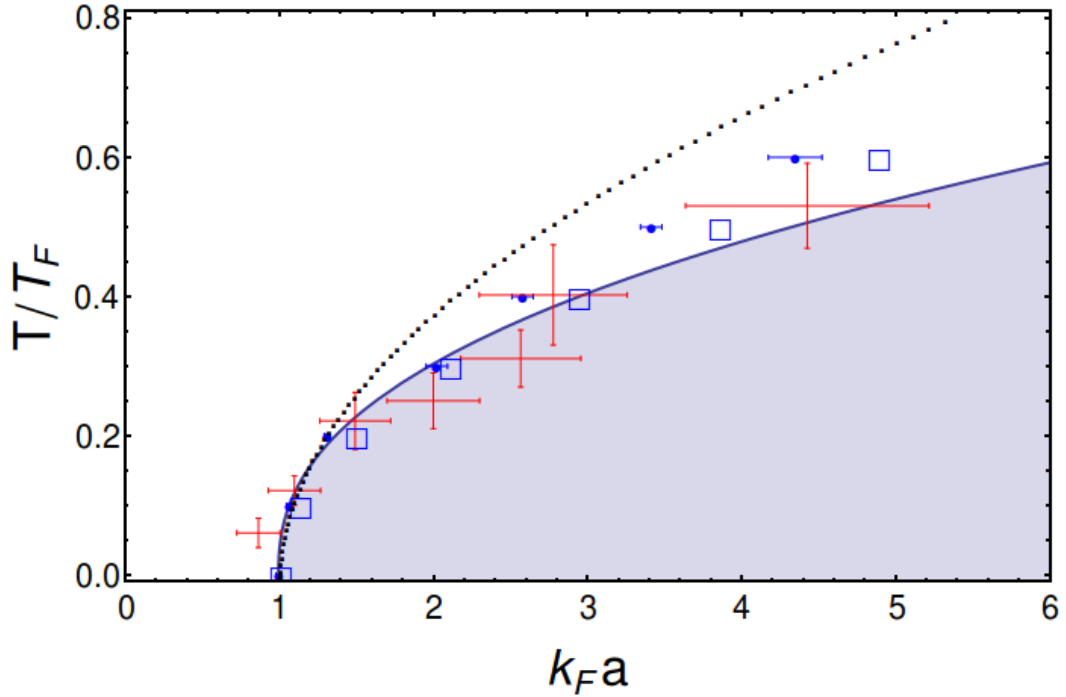
Wyniki przedstawione na rysunku 4.10, pokazują współczynnik tłumienia oscylacji spin-dipolowych i są zgodne z pomiarami doświadczalnymi [37]. Poniżej wartości krytycznej $k_F a$, kiedy częstotliwość ω_{SD} maleje, tłumienie oscylacji szybko rośnie. Powyżej wartości krytycznej $k_F a$, kiedy częstotliwość ω_{SD} skacze do wartości $2\omega_z$, tłumienie znacznie maleje. Takie zachowanie zachodzi dla wszystkich rozważanych temperatur.

Na koniec wszystkie otrzymane wyniki zostały zebrane na rysunku 4.11, przedstawiającym krytyczne wartości odpychania $(k_F a)_{kr}$ dla analizowanych temperatur. Niebieskie punkty przedstawiają wyniki numeryczne wyznaczone z analizy oscylacji spin-dipolowych jak na rysunku 4.9. Czerwone krzyżyki przedstawiają dane doświadczalne wzięte z [37], które wyznaczono mierząc stabilność ferromagnetycznego stanu w stosunku do dyfuzji spinów.



RYSUNEK 4.10: Współczynnik tłumienia modu spin-dipolowego w funkcji $k_F a$ dla różnych temperatur. Tak jak w eksperymencie [37], zauważamy silny wzrost tłumienia oscylacji spin-dipolowych kiedy zbliżamy się do krytycznej wartości $k_F a$. Po przejściu przez krytyczny region tłumienie oscylacji staje się znowu małe.

Zgodnie z [37], metastabilny ferromagnetyczny stan pojawia się dla wartości ($k_F a$) bliskiej jedności, przy której częstotliwość modu spin-dipolowego nagle skacze do wyższych wartości. Rzeczywiście wyniki numeryczne zgadzają się z danymi doświadczalnymi, pomimo tego, że rozważany układ był wielokrotnie mniejszy niż układ doświadczalny. Niezależność $(k_F a)_{kr}$ od liczby atomów została już przedstawiona w pracy [11] dla temperatury $T = 0K$ oraz w pracy [31] dla skończonej temperatury.



RYSUNEK 4.11: Diagram fazowy pokazujący krytyczną wartość oddziaływania odpychającego $(k_F a)_{kr}$ w zadanych temperaturach wyznaczoną z analizy modu spin-dipolowego tak jak na rysunku 4.9 (niebieskie punkty z naniesioną poziomo niepewnością). Poza $(k_F a)_{kr}$ układ pozostaje w stanie ferromagnetycznym (szary obszar na diagramie). Czerwone krzyżyki przedstawiają dane doświadczalne wzięte z [37] (rysunek 3 d), wyznaczone na podstawie pomiarów dyfuzji domen spinowych. Niebieskie punkty pochodzą z obliczeń numerycznych, uśrednionych po 10 konfiguracjach dla każdej z temperatur. Kropkowana linia to najniższy rząd rozwinięcia Sommerfelda, natomiast niebieskie kwadraty przedstawiają energie wyliczone numerycznie. Linia ciągła to dofitowanie potęgowe do punktów numerycznych dla temperatur $T/T_F < 0.4$. Liczba atomów wynosi $N = 48$.

Żeby zrozumieć to uniwersalne zachowanie dla gazu w niezerowej temperaturze przyjmujemy model Stonera opisujący wędrujący ferromagnetyzm. Aby znaleźć wartość krytyczną odpychającego oddziaływania porównujemy energię kinetyczną gazu do energii oddziaływania [38]. W jednorodnym układzie w temperaturze 0K przy użyciu przybliżenia Thomasa-Fermiego dostajemy $(k_F a)_{kr} = \pi/2$. Uwzględniając w rozważaniach skończoną temperaturę, rozwinięcie Sommerfelda najniższego rzędu daje:

$$(k_F a)_{kr} = \pi/2 [1 + 5\pi^2/12 (T/T_F)^2]. \quad (4.25)$$

Jednak w tym równaniu musimy uwzględnić dwie poprawki. Jak wiemy z doświadczenia [37] i prac teoretycznych [29], [11],[6], [12] w temperaturze 0K

krytyczne odpychanie jest w rzeczywistości mniejsze i bliższe 1. Po pierwsze w [29], aby otrzymać prawidłową wartość $(k_{Fa})_{kr}$ została znormalizowana stała sprzężenia w oddziaływaniu między cząstkami o przeciwnych spinach. Po drugie czynnik zależny od temperatury powinien raczej odpowiadać przypadkowi potencjału harmonicznego. Tak więc mamy:

$$(k_{Fa})_{kr} \approx [1 + 2\pi^2/3 (T/T_F)^2], \quad (4.26)$$

granica pomiędzy fazą paramagnetyczną i ferromagnetyczną jest zaznaczona na rysunku 4.11 jako kropkowana linia. Zgodność z wynikami numerycznymi jak i doświadczalnymi [37] zachodzi tylko dla niskich temperatur, ponieważ przybliżenie Sommerfelda może być zastosowane tylko w tym zakresie [5]. Możemy poprawić tą zgodność obliczając energię układu używając wielkiego zespołu kanonicznego:

$$E(T) = \sum_{n=1}^{n_{max}} \varepsilon_n (\exp[\beta (\varepsilon_n - \mu(T))] + 1)^{-1}. \quad (4.27)$$

Na rysunku 4.11 T/T_F jako funkcję $(k_{Fa})_{kr} = E(T)/E(T = 0)$ przedstawiają niebieskie kwadraty. Jak widzimy zgodność jest lepsza w całym zakresie temperatur. Może być to zaskoczeniem, że równanie na energię $E(T)$ takie jak dla gazu doskonałego tak dobrze działa w tym przypadku. Jest tak, ponieważ przy krytycznej wartości (k_{Fa}) dwie chmury atomów stają się rozseparowane. Oczywiście ta separacja nie jest idealna tak jak była na samym początku w czasie $t = 0$. Występuje tu pewna ściana domenowa pomiędzy składnikami, gdzie atomy o przeciwnych spinach mieszają się i oddziałują ze sobą odpychając się utrzymując separację chmur. Dodatkowo na brzegach gaz jest ciągle niespolaryzowany (przekrywanie się składników na peryferiach zanika dopiero przy odpowiednio większym odpychaniu). Z pewnością występowanie ściany domenowej modyfikuje energię jednocząstkowe ε_n dla dużych n . Ta zmiana rośnie wraz z temperaturą (lub wraz z siłą oddziaływania) równocześnie efektywna przestrzenna bariera maleje. Dlatego dla wyższych temperatur wyniki przybliżenia (niebieskie kwadraty na rysunku 4.11) odsuwają się od wyników numerycznych (niebieskie punkty). Pomimo wszystko zgodność jest dobra.

Rozdział 5

Model hydrodynamiczny

W tym rozdziale przedstawiony zostanie model hydrodynamiczny użyty do opisu dynamiki mieszaniny fermionów o przeciwnych spinach. W przeciwieństwie do modelu Hartree-Focka, gdzie każdy fermion opisany jest własnym spin-orbitalem, podejście hydrodynamiczne pozwala na opis układu złożonego z dużej liczby cząstek. Liczba cząstek wchodzi do równań jako parametr i złożoność obliczeniowa wraz ze wzrostem liczby atomów rośnie znacznie wolniej niż w przypadku modelu Hartree-Focka. Ten aspekt zostanie dokładniej omówiony w części poświęconej numeryce. Omawiany model zostanie ponownie użyty do opisu wyników doświadczenia [37], ale tym razem będzie możliwe osiągnięcie liczby atomów takiej jak w doświadczeniu.

5.1 Teoria

Do opisu jednoskładnikowego gazu używamy półklasycznej funkcji rozkładu $f_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ takiej, że wyrażenie $f_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})d\mathbf{r}d\mathbf{p}/(2\pi\hbar)^3$ daje średnią liczbę cząstek w elemencie przestrzeni fazowej $d\mathbf{r}d\mathbf{p}$. W równowadze termodynamicznej w temperaturze T i z potencjałem chemicznym μ dla zdegenerowanego gazu Fermiego mamy:

$$f_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{e^{[\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) - \mu]/k_B T} + 1}, \quad (5.1)$$

gdzie $\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ jest energią cząstki w punkcie \mathbf{r} . Dla jednoskładnikowego doskonałego gazu Fermiego w pułapce ta energia wynosi:

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{tr}(\mathbf{r}). \quad (5.2)$$

Gęstość cząstek obliczamy całkując funkcję rozkładu po wszystkich pędach $n(\mathbf{r}) \sim \int f_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})d\mathbf{p}$. Pozostałe składniki energii mogą być dodane do równania (5.2) w szczególności składnik odpowiadający poprawce Weizsäckera:

$$E_W = \zeta(T) (\hbar^2/2m) \int (\nabla \sqrt{n(\mathbf{r})})^2 d\mathbf{r}, \quad (5.3)$$

gdzie $\zeta(T)$ to współczynnik słabo zależny od temperatury [28]. Wprowadzając drugi fermionowy składnik o przeciwnym spinie należy dodać jeszcze

energię oddziaływania. Przyjmujemy, że oddziaływanie pomiędzy fermionami o przeciwnych spinach zależy tylko od ich gęstości $V_{int}(n_+, n_-)$ (odtąd rozróżnianych poprzez dodanie indeksów '+' i '-'), stąd równanie (5.2) przedstawia się następująco:

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{tr}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_W^+}{\delta n_+} + \frac{\delta V_{int}}{\delta n_+}. \quad (5.4)$$

Gęstość cząstek składnika '+' wyliczamy ze wzoru:

$$n_+(\mathbf{r}) = \int \frac{1}{e^{[\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) - \mu_+]/k_B T} + 1} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{\lambda^3} f_{3/2}(z_+), \quad (5.5)$$

a gęstość energii związanej z ruchem cząstek ze wzoru:

$$\varepsilon_+(\mathbf{r}) = \int \frac{\mathbf{p}^2/2m}{e^{[\varepsilon_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) - \mu_+]/k_B T} + 1} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{3}{2} \frac{k_B T}{\lambda^3} f_{5/2}(z_+), \quad (5.6)$$

gdzie k_B to stała Boltzmana, $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$ jest termiczną długością fali, a $f_{3/2}(z)$ i $f_{5/2}(z)$ to standardowe funkcje dla fermionów [13]. Parametr z_+ nazywany jest aktywnością i wynosi:

$$z_+(\mathbf{r}) = e^{(\mu_+ - V_{tr}(\mathbf{r}) - \delta E_W^+/\delta n_+ - \delta V_{int}/\delta n_+)/k_B T}. \quad (5.7)$$

Potencjał chemiczny μ_+ jest wyznaczony z warunku normalizacji

$$N_+ = \int n_+(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5.8)$$

Zgodnie z propozycją Kohna i Shama [20] uogólniającą formalizm funkcjonału gęstości dla przypadku skończonej temperatury, do dalszej analizy energii układu powinna zostać zamieniona na energię swobodną F :

$$F = U - TS, \quad (5.9)$$

gdzie U jest energią związaną ruchem cząstek, a S jest entropią, która wynosi:

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{\mu, V}. \quad (5.10)$$

Dla gazów Bosego i Fermiego mamy [2]:

$$\Omega = -\frac{2}{3}U, \quad (5.11)$$

stąd otrzymujemy wyrażenie na entropię gazu Fermiego:

$$S = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{\mu, V}. \quad (5.12)$$

Możemy teraz wyliczyć gęstość energii swobodnej, która wynosi:

$$f_+(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{\lambda^3} [(\ln z_+) f_{3/2}(z_+) - f_{5/2}(z_+)]. \quad (5.13)$$

Dodatkowo w przypadku dynamicznym funkcjonal energii musi zostać zmodyfikowany poprzez dodanie energii makroskopowego przepływu. W związku z tym funkcjonal opisujący komponent '+', który jest minimalizowany aby otrzymać równania opisujące dynamikę tego układu wynosi:

$$F_+(n_+, \mathbf{v}_+) = \int f_+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int n_+ \frac{1}{2} m \mathbf{v}_+^2 d\mathbf{r} + \int V_{tr}(\mathbf{r}) n_+ d\mathbf{r} + E_W + \int V_{int}(n_+, n_-) d\mathbf{r}, \quad (5.14)$$

gdzie $\mathbf{v}_+(\mathbf{r})$ to pole prędkości makroskopowego przepływu fermionowego składnika '+', a drugi człon w równaniu opisuje energię tego przepływu. Następnie wprowadzamy pseudo funkcję falową $\psi_+(\mathbf{r})$ ($n_+ = |\psi_+|^2$) dla komponentu '+' w taki sposób, że:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi_+^*) (\nabla \psi_+) = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla |\psi_+|)^2 + n_+ \frac{1}{2} m \mathbf{v}_+^2. \quad (5.15)$$

Funkcjonał z równania (5.14) transformuje się do:

$$F_+(\psi_+, \nabla \psi_+) = \int f_+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_+^* \nabla^2 \psi_+ \right) d\mathbf{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla |\psi_+|)^2 d\mathbf{r} + \int V_{tr}(\mathbf{r}) n_+ d\mathbf{r} + E_W + \int V_{int}(n_+, n_-) d\mathbf{r}. \quad (5.16)$$

Takiego samego funkcjonału używamy dla drugiego komponentu mieszanki fermionów. Równania ruchu są postaci:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta}{\delta \psi_{\pm}^*} F_{\pm}[\psi_{\pm}, \nabla \psi_{\pm}]. \quad (5.17)$$

Ponieważ:

$$\frac{\delta}{\delta n_{\pm}} \int f_{\pm}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = k_B T \ln z_{\pm}, \quad (5.18)$$

równania ruchu możemy zapisać:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\pm}}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 |\psi_{\pm}|}{|\psi_{\pm}|} + k_B T \ln z_{\pm} + V_{tr} - \zeta(T) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n_{\pm}}}{\sqrt{n_{\pm}}} + \frac{\delta V_{int}}{\delta n_{\pm}} \right) \psi_{\pm}. \quad (5.19)$$

Rozwiązując równanie (5.19) aktywność $z_{\pm}(\mathbf{r})$ znajdujemy z warunku samozgodnienia $f_{3/2}(z_{\pm}) = \lambda^3 n_{\pm}$ równanie (5.5), gdzie $n_{\pm} = |\psi_{\pm}|^2$.

5.2 Wyniki numeryczne

W pierwszej kolejności przedstawione zostaną numeryczne wyniki oscylacji spin-dipolowych odpychającego się gazu Fermiego tak jak w doświadczeniu [37]. W kolejnym podrozdziale przedstawione zostaną wyniki numeryczne oscylacji słabo oddziałującej odpychającej się mieszaniny fermionów zamkniętych w pułapce sferycznie symetrycznej.

5.2.1 Oscylacje spin-dipolowe

Obliczenia numeryczne tak jak w przypadku modelu orbitalowego przeprowadzone zostały w Centrum Obliczeniowym Wydziału Fizyki UwB na Wydziałowym Klastrze Obliczeniowym, a także w Uniwersyteckim Centrum Obliczeniowym. Centrum Uniwersyteckie dysponuje klastrem składającym się z 72 jednostek obliczeniowych, z których każda wyposażona jest w dwa procesory Xeon E5-2650, 64 GB pamięci operacyjnej i szybką pamięć dyskową SSD 64 GB.

Symulacja oscylacji spin-dipolowych dla liczby atomów $N = 1000 + 1000$ była prowadzona na siatce $128 \times 128 \times 1024$, a dla liczby atomów $N = 50000 + 50000$ na siatce $128 \times 128 \times 2048$ z krokiem przestrzennym $dx = dy = 0.1$ i $dz = 0.05$. Długość ewolucji czasowej wynosiła 30 w jednostkach oscylatorowych, a krok czasowy $dt = 0.0001$. Rzeczywisty czas jednej ewolucji dla liczby atomów $N = 1000 + 1000$ wynosiła prawie 7 dni, a dla liczby atomów $N = 50000 + 50000$ wynosił ponad 11 dni.

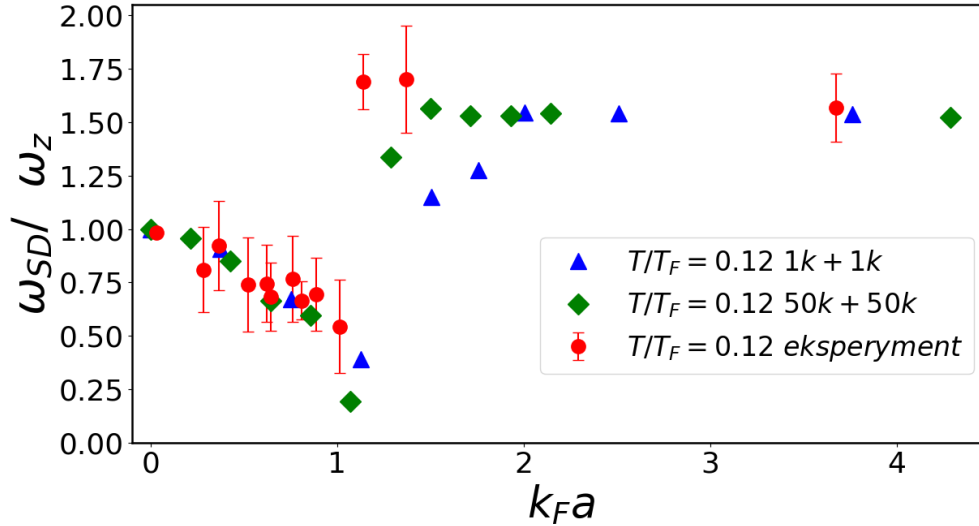
Aby przeprowadzić symulację numeryczną doświadczenia najpierw musimy wyznaczyć stan początkowy dwuskładnikowego gazu Fermiego. Dokonujemy tego rozwiązując równanie (5.19) w czasie urojonym [10] w obecności pułapki harmoniczej w kształcie cygara o częstotliwościach radialnych i osiowej równych odpowiednio $\omega_{\perp} = 2\pi \times 265$ Hz i $\omega_z = 2\pi \times 21$ Hz oraz w obecności odpychającej optycznej bariery. Następnie usuwamy optyczną barierę i ewoluujemy otrzymane z czasu urojonego ψ_{\pm} rozwiązując równanie (5.19) w czasie rzeczywistym. Obserwujemy dynamikę układu obliczając względną odległość $d(t)$ pomiędzy środkami mas dwóch chmur atomów o przeciwnych spinach. Analizując $d(t)$ w funkcji czasu wyznaczamy częstotliwość oraz tłumienie modu spin-dipolowego tak samo jak to było zrobione w rozdziale 4 oraz pracach [32], [31]. Analiza danych została wykonana przy pomocy programu „Mathematica”. Plik wejściowy zawierał średnią odległość $d(t)$ między środkami masy dwóch chmur atomowych o przeciwnych spinach. Używając funkcji „NonlinearModelFit” dopasowano dane wejściowe do funkcji $f(t) = c_0 + c_1 t + c_2 e^{-\Gamma t} \sin(\omega_{SD} t + \varphi)$.

Aby otrzymać zgodność z danymi doświadczalnymi w modelu należy wprowadzić do oddziaływania wielociałowe korelacje. Dokonujemy tego tak jak poprzednio w rozdziale 4 poprzez renormalizację stałej oddziaływania [11], [32], [33], [31]. Dla jednorodnego układu realizowane jest to poprzez rozwinięcie energii dwuskładnikowego gazu Fermiego w parametrze $k_F a$, gdzie k_F to liczba falowa Fermiego, a a to długość rozpraszania fali s. W

przybliżeniu pola średniego gęstość energii oddziaływania wynosi gn_+n_- , gdzie $g = 4\pi\hbar^2 a/m$, a czynnik z równania (5.19) $\delta V_{int}/\delta n_{\pm} = gn_{\mp}$. Po renormalizacji:

$$gn_{\mp} \rightarrow gn_{\pm} + A(4/3 n_{\mp}^{1/3} n_{\pm} + n_{\pm}^{4/3}) + B(5/3 n_{\mp}^{2/3} n_{\pm} + n_{\pm}^{5/3}),$$

gdzie $A = 3ga(6\pi^2)^{1/3}(11 - 2\ln 2)/35\pi$, a $B = 3ga^2(6\pi^2)^{2/3}\pi/4 \times 0.23$ [11].



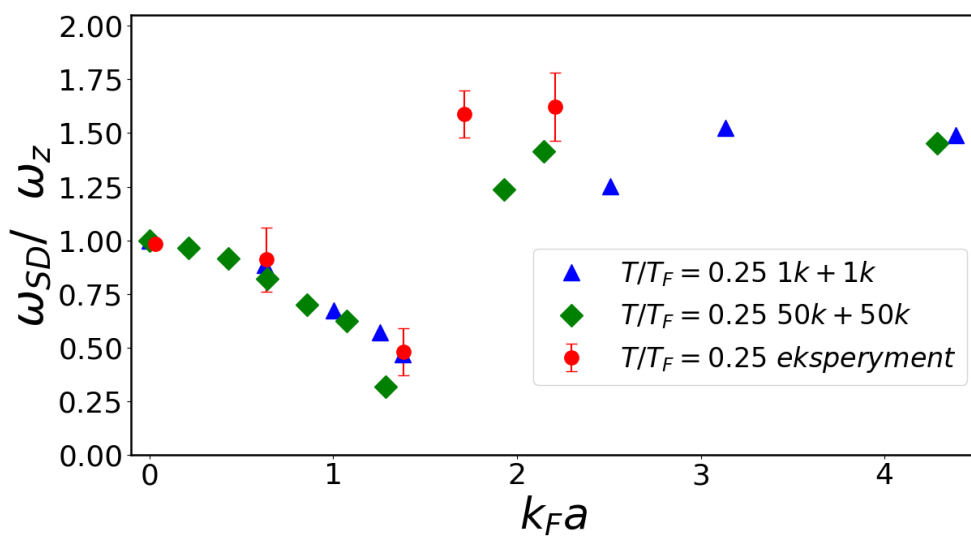
RYSUNEK 5.1: Częstotliwości modu spin-dipolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja kFa w temperaturze $T/T_F = 0.12$ w porównaniu do danych doświadczalnych [37]. Obliczenia numeryczne wykonano dla dwóch liczb atomów $N/2 = 50000$ (tak jak w doświadczeniu) i $N/2 = 1000$.

Rysunki 5.1 i 5.2 przedstawiają częstotliwości modu spin-dipolowego uzyskane z symulacji numerycznych w dwóch temperaturach, które były badane doświadczalnie [37] (rysunek 2). Obliczenia numeryczne wykonane były dla układu o liczbie atomów tak jak w doświadczeniu (50000 atomów w każdym składniku) i dla mniejszego układu o liczbie atomów $N/2 = 1000$. Sprawdzono również, że dla większej liczby atomów ($N/2 = 50000$) można zaniedbać w równaniu (5.19) czynnik:

$$\xi(T) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 \sqrt{n_{\pm}}}{\sqrt{n_{\pm}}},$$

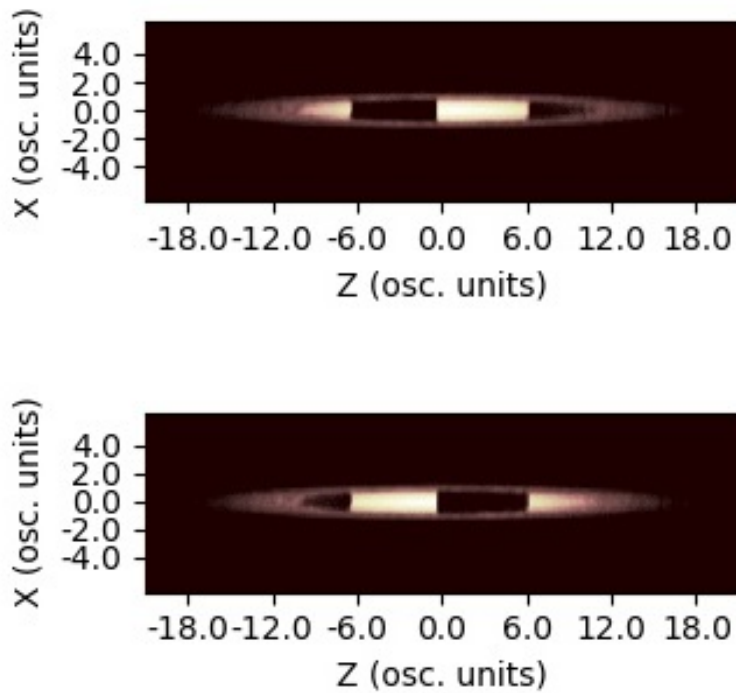
odpowiadający poprawce Weizsäckera. Symulacje numeryczne z uwzględnieniem poprawki Weizsäckera oraz bez tej poprawki dają te same wartości częstotliwości oscylacji spin-dipolowych. Na obu rysunkach widzimy ogólną

zgodność wyników numerycznych i doświadczalnych. Obliczenie numeryczne pokazują zmiękczenie modu spin-dipolowego występujące przy przejściu z fazy paramagnetycznej do fazy ferromagnetycznej. Model hydrodynamiczny, który został użyty w symulacji numerycznej daje prawidłowe wartości k_{Fa} , przy których następuje to przejście fazowe. W zerowej temperaturze było już to zrozumiałe, że zjawisko zmiękczenia modu spin-dipolowego zależy wyłącznie od k_{Fa} [30]. Symulacje modelu hydrodynamicznego potwierdzają tę obserwację również dla niezerowych temperatur (rysunki 5.1 i 5.2), [31]. Zgodnie z modelem Stonera również przejście do fazy ferromagnetycznej zależy wyłącznie od k_{Fa} co również potwierdzają wyniki symulacji numerycznych. Powyżej wartości krytycznej k_{Fa} oba składniki przestają

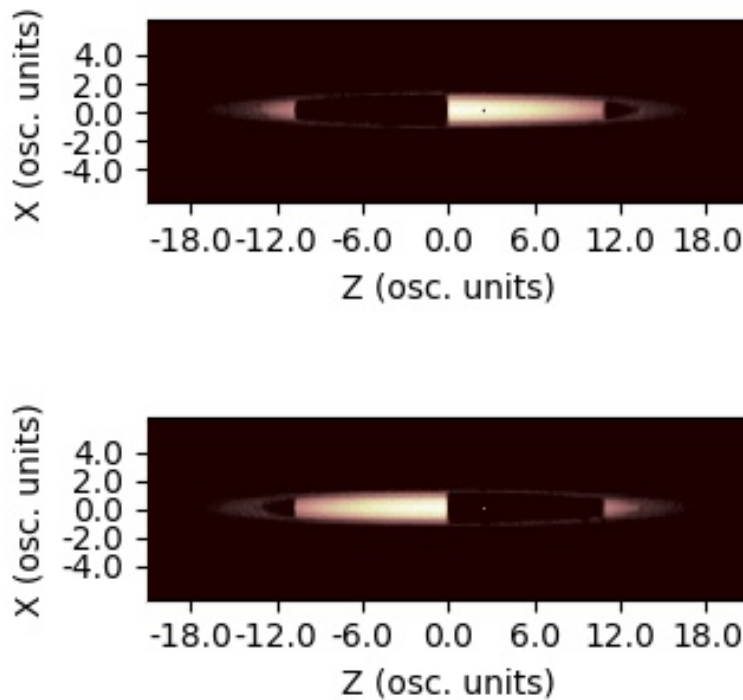


RYSUNEK 5.2: Częstotliwości modu spin-dipolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja k_{Fa} w temperaturze $T/T_F = 0.25$ w porównaniu do danych doświadczalnych [37]. Obliczenia numeryczne wykonano dla dwóch liczb atomów $N/2 = 50000$ (tak jak w doświadczeniu) i $N/2 = 1000$.

się przenikać i oscylują z częstotliwością mniejszą niż podwojona częstotliwość osiowa pułapki co jest zgodne z doświadczeniem. Wyniki numeryczne są zgodne dla obydwu przypadków $N/2 = 1000$ i $N/2 = 50000$. Widać jedynie różnicę w rozmiarze strefy przejściowej (pomiędzy fazą paramagnetyczną i fazą ferromagnetyczną). Rozmiar tej strefy zależy od liczby atomów w próbce. Dla większej liczby atomów ($N/2 = 50000$) układ szybciej osiąga docelową wartość częstotliwości oscylacji spin-dipolowych w fazie ferromagnetycznej niż układ o mniejszej liczbie atomów ($N/2 = 1000$). Dzieje się tak ponieważ dla układu o mniejszej liczbie atomów ($N/2 = 1000$) nawet po przekroczeniu krytycznej wartości k_{Fa} obserwujemy przenikanie się atomów o przeciwnych spinach na brzegach chmury (rysunek 5.3). W strefie przejściowej chmury atomów częściowo nadal się przenikają na peryferiach. Dopiero dla większych wartości k_{Fa} chmury atomów przestają się przenikać

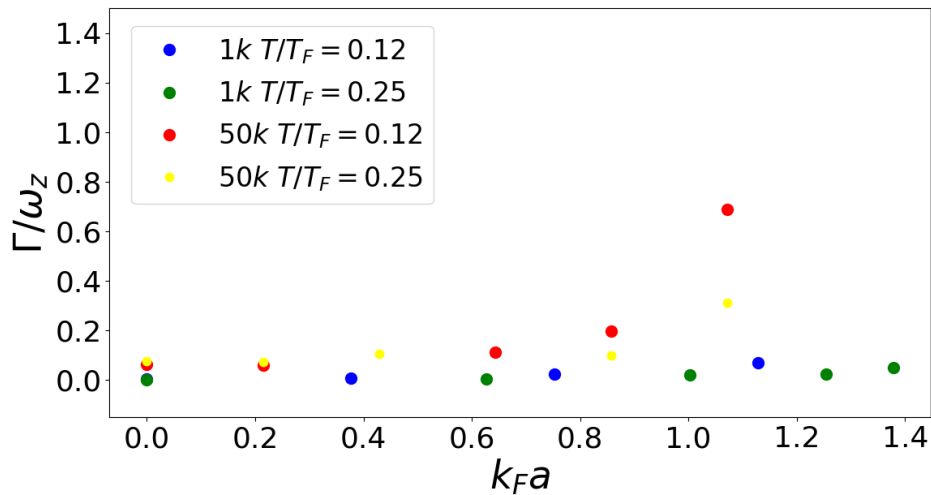


RYSUNEK 5.3: Rozkład gęstości atomów o przeciwnych spinach w płaszczyźnie XZ w temperaturze $T/T_F = 0.12$, $k_F a = 1.50438$ i $N/2 = 1000$.



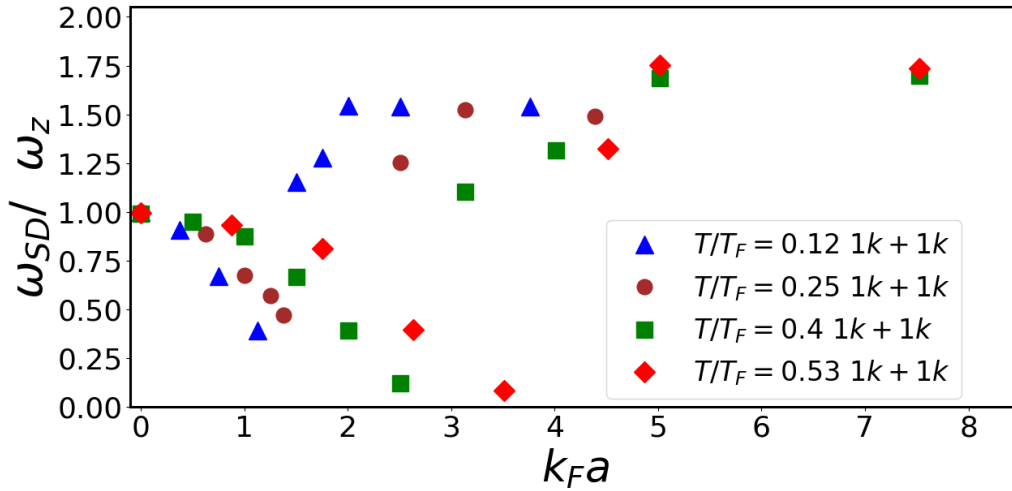
RYSUNEK 5.4: Rozkład gęstości atomów o przeciwnych spinach w płaszczyźnie XZ w temperaturze $T/T_F = 0.12$, $k_F a = 2.5073$ i $N/2 = 1000$.

(rysunek 5.4). Dla większej liczby atomów ($N/2 = 50000$) to przejście zachodzi szybciej. Wynika to z faktu, że tłumienie spin-dipolowych oscylacji rośnie przy zbliżaniu się do wartości krytycznej $k_F a$ i to tłumienie jest większe dla układu z większą liczbą atomów (rysunek 5.5). Ze wzrostem temperatury tłumienie maleje i dlatego też obszar przejściowy robi się szerszy.



RYSUNEK 5.5: Tłumienie modu spin-dipolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja $k_F a$ w różnych temperaturach dla dwóch liczb atomów $N/2 = 1000$ i $N/2 = 50000$.

Rysunek 5.6 przedstawia oscylacje spin-dipolowe w kolejnych dwóch temperaturach $T/T_F = 0.4$ i $T/T_F = 0.53$ układu złożonego z $N/2 = 1000$ atomów w każdym składniku. Te temperatury były badane w doświadczeniu [37] jednak nie poprzez analizę oscylacji spin-dipolowych, a poprzez badanie stabilności wygenerowanych domen spinowych.



RYSUNEK 5.6: Częstotliwości modu spin-dipolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja $k_F a$ w różnych temperaturach. Obliczenia numeryczne wykonano dla liczby atomów $N/2 = 1000$.

Rysunek 5.7 przedstawia diagram fazowy, który zawiera wyniki odpowiadające przejściu pomiędzy fazami paramagnetyczną i ferromagnetyczną. Na diagramie pokazane są wartości krytyczne $k_F a$ w funkcji temperatury. Czerwone krzyże przedstawiają wyniki eksperymentalne [37], a niebieskie punkty to wyniki obliczeń numerycznych. Linia ciągła to dopasowanie potęgowe do punktów numerycznych, które rozdziela fazę paramagnetyczną (białe pole) od ferromagnetycznej (szare pole). Przy danej wartości $k_F a$ kiedy temperatura układu maleje pojawia się faza ferromagnetyczna co jest jakościowo zgodne z modelem Stonera wędrującego ferromagnetyzmu. Faza ferromagnetyczna pojawia się kiedy oddziaływanie jest w stanie przeciwstawić się ciśnieniu kwantowemu, które maleje wraz z temperaturą.

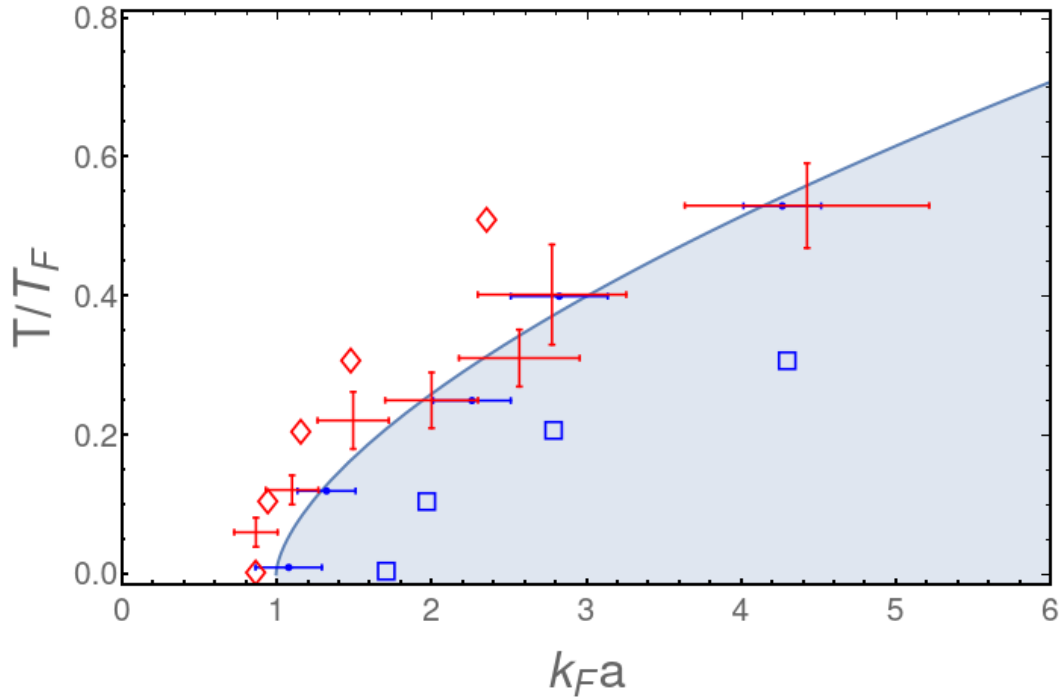
Aby sprawdzić ilościowo wyniki obliczeń numerycznych (dynamiki) z modelem Stonera (statycznym) porównujemy energię kinetyczną gazu z energią oddziaływania w równowadze [38]. W najprostszym przypadku w przybliżeniu pola średniego energia oddziaływania wynosi:

$$g \int n_+ n_- d\mathbf{r}, \quad (5.20)$$

a powyższe porównanie energii wynosi:

$$\frac{3 k_B T}{2 \lambda^3} \int f_{5/2}(z_+) d\mathbf{r} = \frac{4\pi \hbar^2}{m k_F} \left(\int n_+ n_- d\mathbf{r} \right) (k_F a)_{kr}. \quad (5.21)$$

Wartość krytyczną odpychającego oddziaływania $(k_F a)_{kr}$ znajdujemy przyjmując równe gęstości składników $n_+ = n_- = f_{3/2}(z_+)/\lambda^3$ normalizowane do $N_+ = N_- = 1000$ z $z_+ = \exp[(\mu_+ - V_{tr})/k_B T]$. Krytyczna wartość $(k_F a)_{kr}$ w funkcji temperatury T/T_F przedstawiona jest na rysunku 5.7 jako



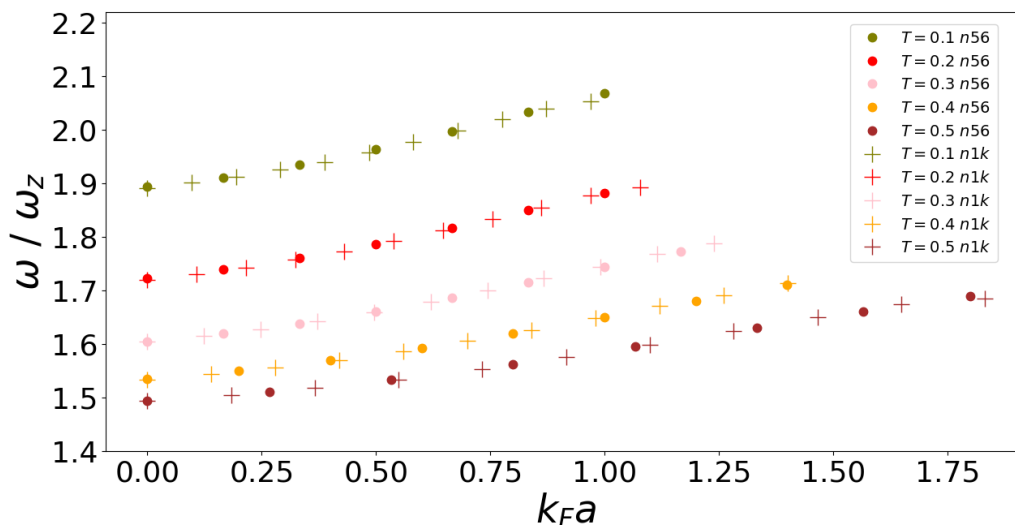
RYSUNEK 5.7: Diagram fazowy pokazujący krytyczną wartość odpychającej siły oddziaływania w poszczególnych temperaturach. Czerwone krzyże to dane doświadczalne [37] (rysunek 3d), a niebieskie punkty to wyniki symulacji numerycznych. Linia ciągła jest dopasowaniem potęgowym do wyników numerycznych i rozdziela fazę paramagnetyczną (białe pole) od fazy ferromagnetycznej (szare pole). Niebieskie kwadraty i czerwone diamenty to przewidywania statycznego modelu Stonera zawierające oddziaływanie pomiędzy atomami odpowiednio nieznormalizowane i znormalizowane.

niebieskie kwadraty. W zerowej temperaturze $(k_F a)_{kr} \approx 1.7$ jest zgodna z wynikami obliczeń zawartymi w pracy [11] [rys. 1(d)]. Kiedy zrenormalizujemy oddziaływanie pomiędzy składnikami równanie (5.21) przechodzi w wielomian trzeciego stopnia w $(k_F a)_{kr}$. Rozwiązanie tego wielomianu w funkcji T/T_F przedstawione jest na rysunku 5.7 jako czerwone diamenty. Teraz w zerowej temperaturze $(k_F a)_{kr} \approx 0.9$ jest zgodne z wynikami doświadczalnymi [37] w najniższej temperaturze. Ogólne zachowanie $(k_F a)_{kr}$ obliczone w powyższy sposób jest podobne zarówno do wyznaczonych doświadczalnie jak i wyliczonych z symulacji numerycznych (reprezentujących dynamiczny efekt Stonera) szczególnie w niskich temperaturach.

5.2.2 Oscylacje słabo oddziałującej odpychającej się mieszaniny fermionów

Mieszanina dwóch chmur atomów o przeciwnych spinach jest zamknięta w sferycznie symetrycznej pułapce. Obydwie chmury są zaburzone w fazie *tz.* jednocześnie ściskamy obydwie chmury poprzez zwiększenie częstotliwości pułapki, a następnie płynnie zmieniamy częstotliwość pułapki poniżej częstotliwości wyjściowej pozwalając chmurom się rozszerzyć. Po kilku takich cyklach zaburzeń układ zaczyna oscylować w pułapce. W ten sposób wzbudzamy sferycznie symetryczne drgania. Znajdujemy częstotliwości tych wzbudzeń obliczając szerokość chmury atomów $\int d^3\mathbf{r} r^2 n_{\pm}(\mathbf{r}, t)$ i analizując jej zależność od czasu.

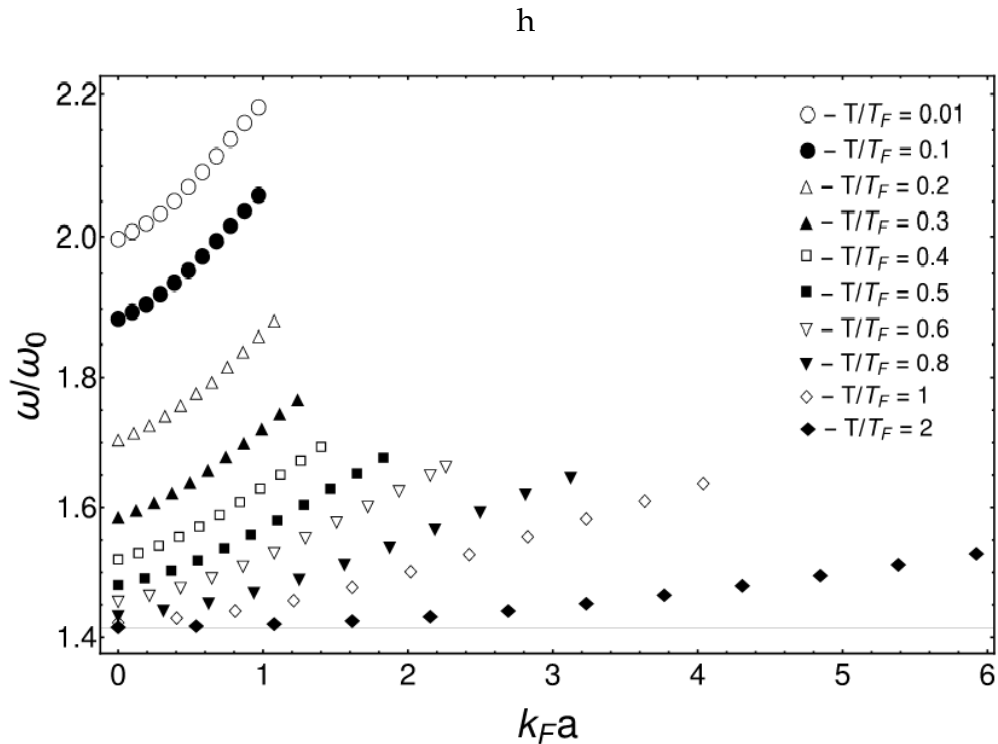
Obliczenia numeryczne zostały wykonane w Centrum Obliczeniowym Wydziału Fizyki UwB na Wydziałowym Klastrze Obliczeniowym. Obliczenia wykonane zostały dla dwóch liczb atomów $N = 56 + 56$ oraz $N = 1000 + 1000$. Symulacja numeryczna dla liczby atomów $N = 56 + 56$ została wykonana na siatce $128 \times 128 \times 128$ z krokiem przestrzennym $dx = dy = dz = 0.15$. Dla liczby atomów $N = 1000 + 1000$ na siatce $64 \times 64 \times 64$ z krokiem przestrzennym $dx = dy = dz = 0.5$ dla temperatur $T/T_F < 0.6$, $dx = dy = dz = 0.6$ dla $T/T_F = 0.6$ i $dx = dy = dz = 0.7$ dla $T/T_F > 0.6$. Długość ewolucji czasowej wynosiła 5 w jednostkach oscylatorowych, a krok czasowy $dt = 0.0005$.



RYSUNEK 5.8: Porównanie częstotliwości modu monopolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja $k_F a$ w różnych temperaturach dla dwóch liczb atomów $N/2 = 56$ i $N/2 = 1000$. Przedstawione wyniki pokazują, że częstotliwości modu monopolowego nie zależą od liczby atomów.

Na rysunku 5.8 przedstawione zostały częstotliwości sferycznie symetrycznych drgań chmur atomowych dla dwóch liczb atomów $N/2 = 56$ i

$N/2 = 1000$. Pokazują one, że częstotliwości modu monopolowego nie zależą od liczby atomów.



RYSUNEK 5.9: Częstotliwości modu monopolowego odpychającego się dwuskładnikowego gazu Fermiego o przeciwnych spinach jako funkcja $k_F a$ w różnych temperaturach. Krytyczna wartość $k_F a$, przy której następuje separacja chmur zależy od temperatury. Pokazane wyniki są oscylacjami wzbudzonymi tylko w fazie paramagnetycznej. Obliczenia numeryczne wykonano dla liczby atomów $N/2 = 1000$ w każdym składniku.

Na rysunku 5.9 przedstawione zostały częstotliwości sferycznie symetrycznych wzbudzeń ($N/2 = 1000$) w różnych temperaturach ograniczone tylko do fazy paramagnetycznej [18], [35], [36], [33], [31]. W zerowej temperaturze (niezamalowane kółka) wyniki idealnie pasują do wyznaczonych zależną od czasu metodą Hartree-Focka [18]. Kiedy dwie chmury nie oddziałują częstotliwość oscylacji wynosi $2\omega_0$, gdzie ω_0 jest częstotliwością pułapki. Kiedy przesuwamy się z parametrem $k_F a$ w kierunku granicy fazy paramagnetycznej i ferromagnetycznej częstotliwość oscylacji rośnie do około $2.2\omega_0$. Dla wyższych temperatur częstotliwości wszystkich modów maleją. Na rysunku 5.10 przedstawione zostały częstotliwości nieoddziałującego gazu Fermiego w funkcji temperatury. Widzimy, że wraz ze wzrostem temperatury częstotliwość maleje i w granicy wysokich temperatur osiąga wartość $\sqrt{2}\omega_0$. Częstotliwości oscylacji w granicy $T > T_F$ mogą być analizowane analitycznie.

Aby analizować małe oscylacje dwuskładnikowego oddziałującego gazu Fermiego w granicy wysokich temperatur wykorzystamy reprezentację Madelunga [22] równania (5.19). Dla składnika $+$ reprezentacja ta wyraża się

jako układ równań na gęstość i pole prędkości:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_+}{\partial t} + \nabla \cdot (n_+ \mathbf{v}_+) &= 0, \\ m \frac{\partial \mathbf{v}_+}{\partial t} + \nabla \left(k_B T \ln z_+ + V_{tr} + \frac{\delta V_{int}}{\delta n_+} + \frac{1}{2} m \mathbf{v}_+^2 \right) &= 0. \end{aligned} \quad (5.22)$$

W granicy wysokich temperatur mamy $n_+ \lambda^3 = f_{3/2}(z_+) \approx z_+$. Małe drgania badane są poprzez założenie małych odchyłeń od stanu równowagi i szukanie periodycznych rozwiązań na te odchylenia. Zapisujemy gęstość jako:

$$n_+ = n_{eq}^+ + \delta n_+, \quad (5.23)$$

gdzie δn_+ jest odchyleniem od gęstości w równowadze oraz zakładamy, że prędkość oraz δn_+ są małe. Ponieważ

$$n_{eq}^+ = \exp [(\mu_+ - V_{tr} - (\delta V_{int}/\delta n_+)_{eq})/k_B T]/\lambda^3, \quad (5.24)$$

a przy oscylacjach w fazie $\delta n_+ = \delta n_-$ równania (5.22) przekształcają się w:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta n_+ &= -\nabla \cdot (n_{eq}^+ \mathbf{v}_+), \\ m \frac{\partial \mathbf{v}_+}{\partial t} &= -\nabla \left[k_B T \frac{\delta n_+}{n_{eq}^+} + G(n_{eq}^+) \delta n_+ \right], \end{aligned} \quad (5.25)$$

gdzie:

$$G(n_{eq}^+) = \left[\left(\frac{\partial}{\partial n_+} + \frac{\partial}{\partial n_-} \right) \frac{\delta V_{int}}{\delta n_+} \right]_{n_+=n_-=n_{eq}^+}, \quad (5.26)$$

i mogą być połączone w jedno równanie na odchylenie gęstości:

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \delta n_+ = \nabla \cdot \left[n_{eq}^+ \nabla \left(k_B T \frac{\delta n_+}{n_{eq}^+} + G(n_{eq}^+) \delta n_+ \right) \right]. \quad (5.27)$$

Teraz można przeprowadzić analizę w granicy słabego oddziaływania. Dla słabego oddziaływania pomiędzy składnikami mieszaniny drugi wyraz prawej strony równania (5.27) można zaniedbać oraz

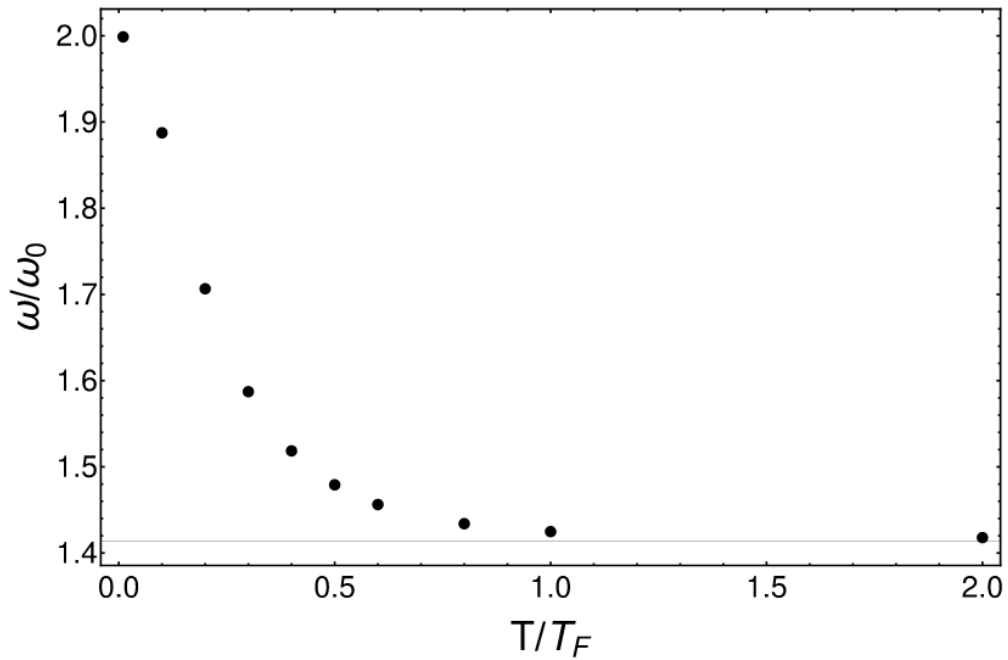
$$n_{eq}^+ = \exp [(\mu_+ - V_{tr})/k_B T]/\lambda^3. \quad (5.28)$$

Równanie (5.27) może być więc zapisane jako:

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\delta n_+}{n_{eq}^+} \right) = k_B T \nabla^2 \left(\frac{\delta n_+}{n_{eq}^+} \right) - (\nabla V_{tr}) \nabla \left(\frac{\delta n_+}{n_{eq}^+} \right). \quad (5.29)$$

Potencjał pułapki jest sferycznie symetryczny $V_{tr} = m\omega_0^2 r^2/2$, więc szukamy periodycznych rozwiązań $\delta n_+/n_{eq}^+ \sim e^{-i\omega t}$ równania (5.29), które są sferycznie symetryczne. Rozwiązanie znajdujemy używając metody szeregów potęgowych. Mod o najniższej energii ma częstotliwość $\omega = \sqrt{2}\omega_0$, która została zaznaczona na rysunku 5.10 jako pozioma linia ciągła. Wynosi on

$$\delta n_+ \sim (1 - m\omega^2 r^2 / (6k_B T)) n_{eq}^+.$$



RYSUNEK 5.10: Częstotliwości modu monopolowego nieoddziałującego gazu Fermiego w funkcji temperatury. Wraz ze wzrostem temperatury częstotliwość dąży do wartości $\sqrt{2}\omega_0$.

Rozdział 6

Podsumowanie

Wyniki otrzymane z modelu orbitalowego, który jako pierwszy został użyty do opisu doświadczenia [37] są ilościowo zgodne z wynikami doświadczalnymi przedstawiającymi krytyczną wartość k_{Fa} , przy której następuje przejście ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego (rysunek 4.11). Pomimo tego, że model opisywał małą próbkę atomów ($24 + 24$) wyniki są ilościowo zgodne. W doświadczeniu stan ferromagnetyczny był metastabilny czyli zanikał po pewnym czasie rzędu kilkunastu ms. Model orbitalowy nie przewiduje takiego zachowania. Częstotliwości oscylacji spin-dipolowych otrzymane z symulacji numerycznych modelu orbitalowego w fazie paramagnetycznej zgadzają się z wynikami otrzymanymi doświadczalnie [37]. „Zmiękczenie modu”, które obserwujemy w wynikach symulacji numerycznych występuje również w wynikach doświadczalnych.

Model hydrodynamiczny, który został użyty jako kolejny model do opisu doświadczenia [37] opisywał zachowanie znacznie większych liczb atomów niż model orbitalowy. Wyniki dla dwóch temperatur $T/T_F = 0.12$ i $T/T_F = 0.25$ zostały otrzymane dla liczby atomów takiej jak w doświadczeniu $N/2 = 5 * 10^4$. Wyniki w pozostałych temperaturach otrzymane zostały dla liczby atomów $N/2 = 10^3$. Częstotliwości oscylacji spin-dipolowych otrzymane z symulacji numerycznych modelu hydrodynamicznego zgadzają się z wynikami otrzymanymi doświadczalnie [37] zarówno w fazie paramagnetycznej jak i w fazie ferromagnetycznej. Krytyczne wartości k_{Fa} , przy których następuje przejście ze stanu paramagnetycznego do stanu ferromagnetycznego otrzymane z symulacji numerycznych są ilościowo zgodne z otrzymanymi w doświadczeniu [37]. Model hydrodynamiczny tak samo jak model orbitalowy nie pokazywał zaniku fazy ferromagnetycznej.

Porównanie wyników otrzymanych przy użyciu modelu orbitalowego z rozdziału 4 oraz w pracach [11] oraz [32] z wynikami otrzymanymi z modelu hydrodynamicznego oraz w pracy [31] pokazuje pewne różnice w wartościach częstotliwości modu spin-dipolowego w fazie ferromagnetycznej. Częstotliwość ta mocno zależy od kształtu potencjału pułapki, która została użyta. W wydłużonej pułapce tak jak w doświadczeniu [37] częstotliwość ta

wynosi około 1.7 (rysunek 5.6). W zerowej temperaturze i sferycznie symetrycznej pułapce częstotliwość zbliża się do podwojonej częstotliwości pułapki [11] z widoczną drugą częstotliwością $\omega_{SD}/\omega = \sqrt{2}$. Używając przybliżenia Hartree-Focka częstotliwości modu spin-dipolowego w fazie ferromagnetycznej są bliskie podwojonej częstotliwości osiowej pułapki niezależnie od temperatury tak jak w rozdziale 4 i [32]. Jest to spowodowane prawdopodobnie tym, że w rozdziale 4 używając metody Hartree-Focka w niezerowych temperaturach atomy nie mogły zmieniać już obsadzonych jednocząstkowych orbitali w trakcie ewolucji czasowej. Raz wybrane metodą Monte Carlo orbitale przed usunięciem bariery rozdzielającej dwa składniki już się nie zmieniają w czasie dynamiki chmur. Opracowanie modelu, który umożliwiłby zmianę obsadzeń w trakcie ewolucji może być przyszłym celem badawczym. Pomimo tego obydwie modele wykazały zależność krytycznej wartości $k_F a$ od temperatury co zgadza się z wynikami doświadczenia [37]. Przejście z fazy paramagnetycznej do fazy ferromagnetycznej wraz ze wzrostem temperatury wymaga większej wartości $k_F a$ co jest zgodne z modelem Stonera wędrującego ferromagnetyzmu.

Również wyniki oscylacji mieszaniny fermionów o przeciwnych spinach w pułapce sferycznie symetrycznej otrzymane przy użyciu modelu hydrodynamicznego zgadzają się z wynikami otrzymanymi metodą Hartree-Focka w zerowej temperaturze [18] i pokazują, że wraz ze wzrostem temperatury częstotliwość oscylacji modu monopolowego zmniejsza się i w granicy wysokich temperatur dąży do wartości $\sqrt{2}\omega_0$.

Bibliografia

- [1] M. H. Anderson i in. "Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor". W: *Science* 269.5221 (lip. 1995).
- [2] A. I. Anselm. "Podstawy fizyki statystycznej i termodynamiki". W: *Państwowe Wydawnictwo Naukowe* (1978).
- [3] G. Bertainia i in. "Quantum Monte Carlo Study of a Resonant Bose-Fermi Mixture". W: *Physical Review Letters* 110.115303 (mar. 2013).
- [4] F. Bloch. W: *Z. Phys* 57.545 (1929).
- [5] D. A. Butts i D. S. Rokhsar. "Trapped Fermi gases". W: *Physical Review A* 55.6 (grud. 1996).
- [6] G. J. Conduit, A. G. Green i B. D. Simons. "Inhomogeneous Phase Formation on the Border of Itinerant Ferromagnetism". W: *Physical Review Letters* 207201.103 (wrz. 2009).
- [7] S. Cowell i in. "Cold Bose Gases with Large Scattering Lengths". W: *Physical Review Letters* 88.210403 (maj 2002).
- [8] K. B. Davis i in. "Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms". W: *Physical Review Letters* 75.22 (list. 1995).
- [9] B. DeMarco i D. S. Jin. "Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas". W: *Science* 285.5434 (wrz. 1999).
- [10] K. Gawryluk i in. "Unified way for computing dynamics of Bose-Einstein condensates and degenerate Fermi gases". W: *International Journal of Computer Mathematics* 95.2143 (wrz. 2017).
- [11] P. T. Grochowski i in. "Unified Description of Dynamics of a Repulsive Two-Component Fermi Gas". W: *Physical Review Letters* 119.215303 (list. 2017).
- [12] L. He i in. "Trapped Fermi gases". W: *Physical Review A* 063629.93 (czer. 2016).
- [13] K. Huang. "Podstawy fizyki statystycznej". W: *Wydawnictwo Naukowe PWN* (2006).
- [14] K. Huang i C. N. Yang. "Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction". W: *Physical Review* 105.767 (lut. 1957).
- [15] H. Ibach i H. Lüth. "Fizyka ciała stałego". W: *Wydawnictwo Naukowe PWN* (1996).
- [16] T. Karpiuk, M. Brewczyk i K. Rzążewski. "Bright solitons in Bose-Fermi mixtures". W: *Physical Review A* 73.053602 (maj 2006).

- [17] T. Karpiuk, M. Brewczyk i K. Rzażewski. "Ground state of two-component degenerate fermionic gases". W: *Physical Review A* 69.043603 (kw. 2004).
- [18] T. Karpiuk i in. "Collective oscillations of a two-component Fermi gas on the repulsive branch". W: *SciPost Physics* 8.66 (kw. 2020).
- [19] T. Karpiuk i in. "Soliton Trains in Bose-Fermi Mixtures". W: *Physical Review Letters* 93.100401 (wrz. 2004).
- [20] W. Kohn i L. J. Sham. "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects". W: *Physical Review* 140.A1133 (list. 1965).
- [21] T. D. Lee i C. N. Yang. "Many-Body Problem in Quantum Mechanics and Quantum Statistical Mechanics". W: *Physical Review* 105.1119 (lut. 1957).
- [22] E. Madelung. "Quantentheorie in hydrodynamischer Form". W: *Zeitschrift für Physik* 40.322 (mar. 1927).
- [23] C. J. Myatt i in. "Production of Two Overlapping Bose-Einstein Condensates by Sympathetic Cooling". W: *Physical Review Letters* 78.586 (sty. 1997).
- [24] V. R. Pandharipande. "Dense neutron matter with realistic interactions". W: *Nuclear Physics A* 174.641 (paż. 1971).
- [25] V. R. Pandharipande. "Hyperonic matter". W: *Nuclear Physics A* 178.123 (grud. 1971).
- [26] V. R. Pandharipande. "Stability condition of a strongly interacting boson-fermion mixture across an interspecies Feshbach resonance". W: *Physical Review A* 83.041603 (kw. 2011).
- [27] V. R. Pandharipande i H. A. Bethe. "Variational Method for Dense Systems". W: *Physical Review C* 7.1312 (kw. 1973).
- [28] F. Perrot. "Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations". W: *Physical Review A* 20.586 (sierp. 1979).
- [29] S. Pilati i in. "Itinerant Ferromagnetism of a Repulsive Atomic Fermi Gas: A Quantum Monte Carlo Study". W: *Physical Review Letters* 105.030405 (lip. 2010).
- [30] A. Recati i S. Stringari. "Spin Fluctuations, Susceptibility, and the Dipole Oscillation of a Nearly Ferromagnetic Fermi Gas". W: *Physical Review Letters* 106.080402 (lut. 2011).
- [31] J. Ryszkiewicz, M. Brewczyk i T. Karpiuk. "Dynamics of large samples of repulsive Fermi gases at nonzero temperatures". W: *Physical Review A* 105.023315 (lut. 2022).
- [32] J. Ryszkiewicz, M. Brewczyk i T. Karpiuk. "Nonzero-temperature dynamics of a repulsive two-component Fermi gas". W: *Physical Review A* 101.013618 (sty. 2020).
- [33] J. von Stecher i C. H. Greene. "Renormalized mean-field theory for a two-component Fermi gas with s-wave interactions". W: *Physical Review A* 75.022716 (lut. 2007).

-
- [34] E. Stoner. "Atomic moments in ferromagnetic metals and alloys with non-ferromagnetic elements". W: *Philosophical Magazine* 1018.15 (1933).
- [35] M.-I. Trappe i in. "Ground-state densities of repulsive two-component Fermi gases". W: *Physical Review A* 93.023612 (lut. 2016).
- [36] M.-I. Trappe i in. "Phase transitions of repulsive two-component Fermi gases in two dimensions". W: *New Journal of Physics* 23.103042 (paź. 2021).
- [37] G. Valtolina i in. "Exploring the ferromagnetic behaviour of a repulsive Fermi gas through spin dynamics". W: *Nature Physics* 13 (kw. 2017), s. 704–709.
- [38] W. Zwerger. "Itinerant Ferromagnetism with Ultracold Atoms". W: *Science* 1507.325 (wrz. 2009).