

Teoria dei condensati di Bose-Einstein

Appunti del corso di Fenomeni Quantistici Macroscopici

Lezioni tenute dal Dott. M. Modugno

A.A. 2008-2009 / 2009-2010

Ringrazio Giacomo Cappellini (A.A. 2008/2009) che ha provveduto alla prima stesura di questi appunti, e Vladislav Gavryusev (A.A. 2009/2010) per suggerimenti e correzioni.

Indice

Introduzione	1
1 Introduzione alla teoria dei campi	3
Bibliografia	10
2 Il potenziale interatomico	11
2.1 Il metodo dello pseudo-potenziale	12
2.1.1 Modello a due sfere rigide	12
2.1.2 Modello con potenziale interatomico	14
2.1.3 Problema a N corpi	15
Bibliografia	18
3 La teoria di Gross-Pitaevskii	19
3.1 L'equazione di Gross-Pitaevskii	20
3.2 L'equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria	21
3.2.1 Il potenziale armonico	23
3.2.2 Il limite Thomas-Fermi	24
3.3 Formulazione idrodinamica	26
Bibliografia	28
4 Equazioni di scaling	29
4.1 Scaling delle equazioni idrodinamiche	29
4.2 Scaling dell'equazione di Gross-Pitaevskii	32
4.2.1 Scaling Thomas-Fermi	34
4.2.2 Scaling non-interagente	34
4.3 Soluzione delle equazioni di scaling	35
4.3.1 Espansione libera	35
4.3.2 Piccole oscillazioni	40
4.4 Scaling di un gas termico non interagente	42
4.4.1 Distribuzione di equilibrio	43
4.4.2 Espansione libera	44
4.5 Distribuzione dei momenti	46
Bibliografia	47

5	Eccitazioni collettive	49
5.1	Eccitazioni di Bogoliubov	49
5.1.1	Eccitazioni di un condensato uniforme	52
5.1.2	Criterio di Landau per la superfluidità	55
5.2	Vortici quantizzati	56
	Bibliografia	58
6	Condensati in reticoli ottici	59
6.1	L'hamiltoniana di Bose-Hubbard	59
6.1.1	Approssimazione gaussiana	63
6.1.2	Calcolo dell'energia di interazione U	64
6.1.3	Calcolo dell'energia di tunneling J	64
6.1.4	Approssimazione di Gutzwiller e diagramma di fase	66
6.2	Instabilità energetica e dinamica	68
6.2.1	Instabilità energetica	70
6.2.2	Instabilità dinamica	73
	Bibliografia	73

Introduzione

I condensati di Bose-Einstein, prodotti in laboratorio utilizzando atomi raffreddati alle temperature del nanokelvin, rappresentano uno strumento altamente versatile per studiare e riprodurre su scala macroscopica un'ampia gamma di fenomeni quantistici e per simulare il comportamento di altri sistemi fisici.

In primo luogo, infatti, i condensati possono essere considerati come onde coerenti di materia, formata da atomi che occupano tutti lo stesso stato, e a causa della loro natura intrinsecamente quantistica e delle dimensioni fino alla scala del millimetro, rappresentano un sistema ideale per studiare effetti quantistici su scala macroscopica. Un esempio di questo è il fatto che la distribuzione di *probabilità* quantistica diventa di fatto la distribuzione di *densità* degli atomi del condensato, che può essere misurata tramite immagini fotografiche digitali.

Un'altro aspetto importante riguarda il fatto che manipolando opportunamente i potenziali a cui sono soggetti gli atomi è possibile riprodurre situazioni in cui l'hamiltoniana che descrive il sistema è la stessa di un altro sistema fisico, di fatto quindi *simulando* il comportamento di quest'ultimo (un esempio ne sono i condensati in reticoli ottici, che posso simulare - per certi aspetti - il comportamento degli elettroni in un cristallo). Questo aspetto realizza l'idea avuta da Feynman agli inizi degli anni '80 di *simulatore quantistico*, e rappresenta una delle attuali frontiere della fisica degli atomi ultrafreddi.

In questi appunti verranno introdotti alcuni concetti generali che stanno alla base della descrizione teorica dei condensati di Bose-Einstein.

Capitolo 1

Introduzione alla teoria dei campi

In questo capitolo mostriamo l'equivalenza tra Meccanica Quantistica per un sistema di N particelle e Teoria dei Campi. Quest'ultima formulazione permette di descrivere il sistema in modo compatto ed efficiente tramite operatori di campo che dipendono da un solo set di coordinate spaziali \vec{r} invece che dalle coordinate $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots, \vec{r}_N\}$ di tutte le particelle.

Consideriamo un gas di N particelle di massa m interagenti con interazioni a due corpi, in presenza di un potenziale esterno $V(\vec{r})$. Questo sistema è descritto dall'hamiltoniana

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V(\vec{r}_i) + \sum_{i<j} v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (1.1)$$

dove $v(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ rappresenta il potenziale di interazioni a due corpi tra le particelle i e j . È conveniente riscrivere l'hamiltoniana precedente nel seguente modo

$$H = K + V + \Omega \quad (1.2)$$

con

$$\begin{aligned} K &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 \\ V &= \sum_i V(\vec{r}_i) \\ \Omega &= \sum_{i<j} v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \end{aligned}$$

dove K è il termine di energia cinetica, V è il termine di interazione di tutte le N particelle con il potenziale esterno e Ω è l'energia di interazione a due corpi tra tutte le particelle del sistema.

Le autofunzioni ψ_n e lo spettro di autovalori E_n dell'hamiltoniana in (1.1) si ottengono risolvendo l'equazione di Schrödinger stazionaria

$$H\psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E_n\psi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.3)$$

dove la funzione d'onda ψ_n è normalizzata nel seguente modo

$$\int d^{3N}r |\psi|^2 = 1$$

La risoluzione dell'equazione diventa impraticabile quando N è un numero grande. Convien quindi utilizzare la teoria dei campi. Faremo di seguito una breve introduzione assiomatica alla teoria dei campi, seguendo la trattazione in [1].

Nella teoria dei campi la funzione d'onda - che dipende da $3N$ coordinate spaziali - viene sostituita da un *operatore di campo* $\hat{\psi}$ che dipende solo da 3 coordinate spaziali

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rightarrow \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (1.4)$$

In questo modo si passa ad una rappresentazione che tiene conto della totalità del sistema e non delle singole particelle che lo compongono.

In questo capitolo mostreremo che questa formulazione è del tutto analoga alla meccanica quantistica. Vedremo poi che nel caso dei condensati di Bose-Einstein è possibile - nell'approssimazione di campo medio - ritornare ad una descrizione tipo Schrödinger in termini di una funzione d'onda (non più un campo) che dipende da un solo set di tre coordinate spaziali, e che riveste il ruolo di funzione d'onda macroscopica del condensato.

Gli operatori di campo sono definiti tramite le seguenti regole di commutazione (nel caso di bosoni):

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')] &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')] &= 0 \\ [\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')] &= 0 \end{aligned} \quad (1.5)$$

Nel caso di fermioni i commutatori sono sostituiti dagli anticommutatori

$$\begin{aligned} \{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\} &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')\} &= 0 \\ \{\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')\} &= 0 \end{aligned} \quad (1.6)$$

Analogamente, l'hamiltoniana è ottenuta tramite operatori costruiti in termini dell'hamiltoniana di partenza e degli operatori di campo, nel seguente modo

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} + \hat{\Omega} \quad (1.7)$$

con

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (1.8)$$

$$\hat{V} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) V(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (1.9)$$

$$\hat{\Omega} = \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) \quad (1.10)$$

dove il fattore 1/2 nella terza equazione serve per contare correttamente le interazioni a due corpi.

Introduciamo ora l'operatore numero \hat{N} , definito come

$$\hat{N} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (1.11)$$

che, come vedremo tra poco, è associato al numero totale di particelle del sistema. Si dimostra facilmente che l'operatore commuta con l'hamiltoniana (questa proprietà vale sia per i bosoni che per i fermioni)

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0 \quad (1.12)$$

ed è quindi possibile scegliere una base di autostati simultanei per \hat{H} e \hat{N} . Indicheremo tali autostati con $|\psi_{EN}\rangle$. Questo autostati sono tali che

$$\hat{H} |\psi_{EN}\rangle = E |\psi_{EN}\rangle \quad (1.13)$$

$$\hat{N} |\psi_{EN}\rangle = N |\psi_{EN}\rangle \quad (1.14)$$

un'altra proprietà dei vettori $|\psi_{EN}\rangle$ è che

$$\langle \psi_{EN} | \psi_{EN} \rangle = 1$$

un particolare stato della base $|\psi_{EN}\rangle$ è lo stato $|\psi_{00}\rangle$, che indicheremo con $|0\rangle$, e che prende il nome di stato di vuoto. Questo è un autostato degli operatori \hat{H} e \hat{N} con autovalore nullo

$$\hat{H} |0\rangle = 0 \quad \hat{N} |0\rangle = 0.$$

Conoscendo la forma dell'operatore numero e tenendo conto del commutatore (1.5) è possibile dimostrare che

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{N}] = \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (1.15)$$

$$[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{N}] = -\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \quad (1.16)$$

Possiamo vedere come questi commutatori presentino un'analogia con i commutatori tra gli operatori di creazione e distruzione \hat{a}^\dagger e \hat{a} e l'operatore di occupazione $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ nel caso dell'oscillatore armonico. Procedendo come in tale caso, possiamo mostrare come gli operatori $\hat{\psi}^\dagger$ e $\hat{\psi}$ operano sugli stati $|\psi_{EN}\rangle$. Ad esempio, usando la (1.15) si ha che

$$\left(\hat{\psi}\hat{N} - \hat{N}\hat{\psi}\right)|\psi_{EN}\rangle = \hat{\psi}|\psi_{EN}\rangle$$

ed analogamente per $\hat{\psi}^\dagger$ (con il segno meno), da cui si ottiene:

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{\psi}|\psi_{EN}\rangle &= (N-1)\hat{\psi}|\psi_{EN}\rangle \\ \hat{N}\hat{\psi}^\dagger|\psi_{EN}\rangle &= (N-1)\hat{\psi}^\dagger|\psi_{EN}\rangle\end{aligned}$$

Procedendo come nel caso dell'oscillatore armonico, dalle equazioni precedenti è possibile mostrare che gli autovalori dell'operatore \hat{N} sono numeri interi e che

$$\hat{\psi}|\psi_{EN}\rangle = \sqrt{N}|\psi_{EN-1}\rangle \quad (1.17)$$

$$\hat{\psi}^\dagger|\psi_{EN}\rangle = \sqrt{N+1}|\psi_{EN+1}\rangle \quad (1.18)$$

Queste equazioni mostrano che gli operatori $\hat{\psi}^\dagger$ e $\hat{\psi}$ sono degli operatori rispettivamente di creazione e distruzione, analogamente agli operatori \hat{a}^\dagger e \hat{a} nel caso dell'oscillatore armonico. In particolare $\hat{\psi}^\dagger$ e $\hat{\psi}$ sono operatori di creazione e distruzione di particelle, fanno cioè passare da stati con n particelle a stati con $N+1$ o $N-1$ particelle (nell'oscillatore armonico creano e distruggono un quanto di energia facendo passare il sistema - una singola particella che non viene né creata né distrutta - da un livello energetico ad uno adiacente).

A questo punto possiamo mostrare come è possibile costruire tramite gli operatori di campo la funzione d'onda ad N particelle della meccanica quantistica. Notiamo intanto che, per la (1.17), vale

$$\langle\psi_{E'N'}|\hat{\psi}(\vec{r}_1), \dots, \hat{\psi}(\vec{r}_N)|\psi_{EN}\rangle \propto \langle\psi_{E'N'}|0\rangle$$

e supponiamo che lo stato di vuoto sia unico

$$\langle\psi_{E'N'}|0\rangle \neq 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\psi_{E'N'}\rangle = |0\rangle.$$

Possiamo quindi costruire una funzione del tipo

$$\psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle \quad (1.19)$$

Nel seguito dimostreremo che questa funzione ha tutte le caratteristiche della funzione d'onda, cioè è correttamente normalizzata e soddisfa l'equazione di

Schrödinger stazionaria (1.3). Verifichiamo innanzitutto che la funzione è normalizzata

$$\begin{aligned}
& \int d^{3N}r \psi_{EN}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \\
& = \frac{1}{N!} \int d^{3N}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) | 0 \rangle \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \\
& = \frac{1}{N!} \sum_{E', N'} \int d^{3N}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) | \psi_{E'N'} \rangle \langle \psi_{E'N'} | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \\
& = \frac{1}{N!} \int d^{3N}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \\
& = \frac{1}{N!} \int d^{3(N-1)}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \hat{N} \hat{\psi}(\vec{r}_2) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle
\end{aligned}$$

Nei passaggi precedenti sono stati prima aggiunti i contributi delle varie $\langle \psi_{EN} | \hat{\psi}(\vec{r}_1), \dots, \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{E'N'} \rangle$ che sono nulli per $|\psi_{E'N'}\rangle \neq |0\rangle$, e poi sfruttata la proprietà di completezza:

$$\sum_{E'N'} |\psi_{E'N'}\rangle \langle \psi_{E'N'}| = 1$$

Utilizzando poi la regola di commutazione (1.15) si ha

$$\hat{N} \hat{\psi} = \hat{\psi} (\hat{N} - 1)$$

e riprendendo dall'ultima equazione del blocco si ha che la catena di uguaglianze continua con

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N!} \int d^{3(N-1)}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_2) (\hat{N} - 1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \\
& \frac{1}{N!} \int d^{3(N-2)}r \langle \psi_{EN} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_N) \dots \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_3) \hat{\psi}(\vec{r}_3) \hat{N} (\hat{N} - 1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle ;
\end{aligned}$$

iterando il procedimento di semplificazione utilizzando i commutatori si ottiene

$$\frac{1}{N!} \langle \psi_{EN} | \hat{N} \cdot (\hat{N} - 1) \dots 1 | \psi_{EN} \rangle = 1.$$

Vediamo ora di dimostrare che la funzione $\psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ così com'è stata costruita soddisfa il seguente teorema che completa l'analogia tra campo quantizzato e sistema ad N corpi (per brevità di notazione definiamo $V_i = V(\vec{r}_i)$, $v_{ij} = v(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$)

Teorema 1. *Sia $\psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle$. Questa soddisfa l'equazione di Schrödinger*

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V_i + \sum_{i < j} v_{ij} \right) \psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Dimostrazione. Dalla (1.13) e dalla definizione di $\psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ si ha che

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) \hat{H} | \psi_{EN} \rangle = E \psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.20)$$

alla precedente possiamo sottrarre il termine $\langle 0 | \hat{H} \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle$, che è nullo essendo $\hat{H} | 0 \rangle = 0$. La (1.20), può essere quindi riscritta come

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \left[\hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N), \hat{H} \right] | \psi_{EN} \rangle = E \psi_{EN}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (1.21)$$

Il commutatore dell'equazione precedente può essere calcolato usando a catena la regola di commutazione

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (1.22)$$

con cui si ottiene

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{j=1}^N \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \left[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{H} \right] \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle \quad (1.23)$$

Calcoliamo il commutatore $[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{H}]$. Dato che $\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} + \hat{\Omega}$ calcoliamo il commutatore per ciascuno dei tre termini.

Per quanto riguarda il termine di energia cinetica si ha

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{K}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \left[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{r}) \right] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \left[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \right] \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \nabla^2 \hat{\psi}(\vec{r}) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 \hat{\psi}(\vec{r}_j) \end{aligned} \quad (1.24)$$

Analogamente, il termine di energia potenziale è semplicemente dato da

$$[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{V}] = V(\vec{r}_j) \hat{\psi}(\vec{r}_j) \quad (1.25)$$

Per il commutatore con il termine di energia di interazione abbiamo invece

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{\Omega}] &= \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \left[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) v_{12} \hat{\psi}(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \left[\hat{\psi}(\vec{r}_j), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \right] v_{12} \hat{\psi}(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) = \\ &= \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) v_{1j} \hat{\psi}(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_j) + \frac{1}{2} \int d\vec{r}_2 \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) v_{j2} \hat{\psi}(\vec{r}_2) \hat{\psi}(\vec{r}_j) = \\ &= \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}_j) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}_j) \end{aligned} \quad (1.26)$$

dove per spezzare i due integrali si è usato la proprietà (1.22), la forma esplicita (1.5) del commutatore, ed infine integrato. Nel passaggio successivo si è sfruttata la simmetria dell'interazione a due corpi, $v_{ij} = v_{ji}$.

Calcoliamo adesso il contributo del primo commutatore alla (1.23)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N!} \sum_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 \right) \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_j) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \\ & = \sum_j \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 \right) \psi_{EN} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Il secondo termine è banalmente

$$\sum_j V(\vec{r}_j) \psi_{EN} \quad (1.28)$$

Infine, per il termine di interazione tra particelle si ha

$$\frac{1}{N!} \sum_j \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}_j) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}_j) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle ; \quad (1.29)$$

questa espressione può essere semplificata considerando l'operatore

$$\hat{X}(\vec{r}_j) = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) v(\vec{r}, \vec{r}_j) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (1.30)$$

che gode delle seguenti proprietà

$$[\hat{\psi}(\vec{r}_i), \hat{X}(\vec{r}_j)] = v_{ij} \psi(\vec{r}_i) ; \quad \hat{X} |0\rangle = 0$$

Dalla prima si ha che

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_{j-1}) \hat{X}(\vec{r}_j) \hat{\psi}(\vec{r}_j) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) = \\ & = \left(\hat{X}(\vec{r}_j) + \sum_{i=1}^{j-1} v_{ij} \right) \psi(\vec{r}_1) \dots \psi(\vec{r}_N); \end{aligned} \quad (1.31)$$

inserendo questa espressione nella (1.29) ed usando la seconda proprietà, si ottiene

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{j-1} v_{ij} \frac{1}{N!} \langle 0 | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \dots \hat{\psi}(\vec{r}_N) | \psi_{EN} \rangle = \sum_{i < j} v_{ij} \psi_{EN} \quad (1.32)$$

Mettendo insieme i termini (1.27), (1.28) e (1.32) si ottiene la tesi. \square

Questa dimostrazione conclude idealmente il collegamento tra meccanica quantistica e teoria dei campi. Nel seguito useremo la teoria dei campi che ha il vantaggio di consentirci di studiare il sistema di gas di bosoni ultrafreddi utilizzando oggetti con una sola coordinata spaziale.

Bibliografia

- [1] Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, second edition, Wiley (1987),
Appendice A.

Capitolo 2

Il potenziale interatomico

In questa sezione vedremo come è possibile scrivere in forma approssimata il potenziale di interazione a due corpi nel caso di un gas diluito. Questa condizione si verifica quando sia la distanza media tra particelle $v^{1/3} \equiv (V/N)^{1/3}$ che la lunghezza d'onda termica λ_T sono entrambe molto maggiori del raggio d'azione a del potenziale. La prima ci dice che la probabilità di trovare due particelle all'interno del raggio di interazione di qualunque altra è piccola, e che è lecito trascurare interazioni a più corpi. Questa è una condizione che vale anche classicamente. La seconda è invece strettamente legata alle proprietà quantistiche: poiché una particella non può localizzarsi su lunghezze più piccole della sua lunghezza d'onda, essa risulta quindi estesa su una scala che è molto più grande del raggio di interazione del potenziale ed i dettagli del potenziale diventano poco importanti. In altre parole, la particella vede solo un effetto medio del potenziale.

Con queste ipotesi vedremo che si può semplificare la forma del potenziale di interazione ponendo

$$v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \equiv g\delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.1)$$

che permette di riscrivere il termine dell'hamiltoniana di campo come

$$\hat{\Omega} = \frac{g}{2} \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Vediamo ora in dettaglio come si procede per ottenere questa espressione, iniziando dal caso semplificato di un sistema a due particelle, ed estendendo poi i risultati al caso di N particelle.

2.1 Il metodo dello pseudo-potenziale

Iniziamo consideriamo un sistema semplice composto da due particelle di massa m , descritto dall'hamiltoniana

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (2.3)$$

se introduciamo le variabili del centro di massa

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \end{array} \right. \quad (2.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \end{array} \right. \quad (2.5)$$

e da quelle relative

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \end{array} \right. \quad (2.6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{p} = \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \end{array} \right. \quad (2.7)$$

L'hamiltoniana può essere riscritta come

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \quad (2.8)$$

e si può separare il moto del centro di massa da quello relativo fattorizzando la funzione d'onda in una parte di onda libera del centro di massa a una parte relativa

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\frac{\vec{P}\cdot\vec{R}}{\hbar}} \psi(\vec{r}) \quad (2.9)$$

con la funzione d'onda relativa che soddisfa l'equazione:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.10)$$

2.1.1 Modello a due sfere rigide

Supponiamo ora che il potenziale di interazione $V(\vec{r})$ sia di tipo sfera rigida di raggio a

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{per } r > a \\ \infty & \text{per } r \leq a; \end{cases} \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

la funzione d'onda è quindi identicamente nulla per $r \leq a$, mentre per $r > a$ l'equazione di Schrödinger si riduce a quella di particella libera con energia $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$:

$$\begin{cases} (\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = 0 & \text{per } r > a \end{cases} \quad (2.13)$$

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}) = 0 & \text{per } r \leq a. \end{cases} \quad (2.14)$$

Vogliamo adesso trovare il modo di eliminare le condizioni al contorno ed avere una sola equazione che però abbia soluzione coincidente con quella del problema originario per $r > a$. Utilizzeremo il metodo degli pseudopotenziali che consiste nel costruire un potenziale con elementi fittizi che simulano le condizioni al contorno consentendoci di eliminarle dal problema.

Iniziamo considerando soluzioni a simmetria sferica, nel limite $k \rightarrow 0$. Il sistema precedente diventa

$$\begin{cases} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) = 0 & \text{per } r > a \\ \psi(r) = 0 & \text{per } r \leq a \end{cases} \quad (2.15)$$

$$\psi(r) = 0 \quad \text{per } r \leq a \quad (2.16)$$

Il sistema può essere risolto esattamente e si ottiene:

$$\psi(r) = \begin{cases} \chi \left(1 - \frac{a}{r} \right) & \text{per } r > a \\ 0 & \text{per } r \leq a \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\psi(r) = 0 \quad \text{per } r \leq a \quad (2.18)$$

dove χ è un coefficiente che dipende dalle condizioni al contorno.

Definiamo ora un funzione estesa $\psi_{ex}(r)$ (per $r \neq 0$), che soddisfa l'equazione:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{ex}(r) = 0 \quad (2.19)$$

con la condizione al contorno $\psi_{ex}(a) = 0$. Si ha che per $k \rightarrow 0$:

$$\psi_{ex}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \chi \left(1 - \frac{a}{r} \right) \quad (2.20)$$

dove

$$\chi = \frac{\partial}{\partial r} (r\psi_{ex}) \Big|_{r=0} \quad (2.21)$$

Generalizziamo ora l'equazione (2.19) al fine di includere anche il punto $r = 0$. Questo si può fare una volta determinato il comportamento di $(\nabla^2 + k^2)\psi_{ex}$ vicino a $r = 0$. Utilizzando la (2.20) e considerando che siamo nell'ipotesi di $k \rightarrow 0$ si ha:

$$\nabla^2 \psi_{ex}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -4\pi a \delta(\vec{r}) \chi \quad (2.22)$$

in cui si è usato la nota proprietà $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\vec{r})$. Ricordando ora la (2.21) si ottiene:

$$\nabla^2 \psi_{ex}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 4\pi a \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} (r\psi_{ex}) \quad (2.23)$$

In sostanza, per $k \rightarrow 0$ la funzione $\psi_{ex}(r)$ soddisfa ovunque l'equazione:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_{ex}(r) = 4\pi a \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} (r\psi_{ex}) \quad (2.24)$$

Si è quindi introdotto uno pseudopotenziale rappresentato dall'operatore $\delta(\vec{r})(\partial/\partial r)r$. Per piccoli k e per $r > a$ la $\psi_{ex}(r)$ soddisfa la stessa equazione le stesse condizioni a contorno di $\psi(r)$, per cui $\psi_{ex}(r) = \psi(r)$ per $r > a$.

Tuttavia questo risultato è stato ottenuto nell'approssimazione di piccoli k e di onda s . Per ottenere una soluzione più generale è necessario espandere in onde parziali non sfericamente simmetriche e considerare k arbitrari. Si può dimostrare che l'esatto pseudopotenziale di onda s è dato da:

$$-\frac{4\pi}{k \cot \eta_0} \delta(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial r} r \quad (2.25)$$

dove η_0 è lo sfasamento in onda s per il potenziale di sfera rigida:

$$-\frac{1}{k \cot \eta_0} = \frac{\tan ka}{k} = a \left[1 + \frac{1}{3}(ka)^2 + \dots \right] \quad (2.26)$$

Sarebbe inoltre necessario aggiungere serie infinita di altri pseudopotenziali che rappresentano gli effetti di diffusione in onde p , d etc., proporzionali a a^{2l+1} .

Da questo risultati si può vedere che la (2.24) è corretta fino all'ordine a^2 , cioè se la funzione d'onda $\psi(r)$ e l'autovalore k sono sviluppati in serie di potenze di a allora la (2.24) da i coefficienti di a a a^2 corretti.

2.1.2 Modello con potenziale interatomico

Consideriamo ora il caso di due particelle interagenti per mezzo di un generico potenziale interatomico $v(r)$ a raggio d'azione finito che non ammetta stati legati. Facendo nuovamente la separazione tra variabili del centro di massa e relativa si avrà che il moto relativo è governato dall'equazione:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} + v(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.27)$$

ponendo $\hbar^2 k^2 = 2\mu E$ si ottiene:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = v(r) \psi(\vec{r}) \quad (2.28)$$

con delle assegnate condizioni a contorno per $r \rightarrow \infty$. A basse energie è importante soltanto la diffusione delle onde s , pertanto faremo di nuovo le approssimazioni di simmetria sferica e $k \rightarrow 0$. L'equazione precedente si riduce a:

$$u''(r) + k^2 u(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} v(r) u(r) \quad (2.29)$$

dove:

$$u(r) \equiv r\psi(r) \quad (2.30)$$

Poiché si è assunto che $v(r)$ abbia un raggio d'azione finito e non abbia stati legati, nel limite $r \rightarrow \infty$ $u(r)$ tende ad essere una funzione sinusoidale

$$u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} u_\infty(r) \quad (2.31)$$

con

$$u_\infty(r) \equiv r\psi_\infty(r) \propto (\sin kr + \tan \eta_0 \cos kr) \quad (2.32)$$

dove η_0 è lo sfasamento in onda s . Inoltre si ha che per $k \rightarrow 0$:

$$\psi_\infty(r) \propto \frac{1}{r} (\sin kr + \tan \eta_0 \cos kr) \xrightarrow{r \rightarrow 0} c \left(1 + \frac{\tan \eta_0}{kr} \right) \quad (2.33)$$

In generale η_0 è funzione di k ; per piccoli k si ha il seguente sviluppo:

$$k \cot \eta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}k^2 r_0 + \dots \quad (2.34)$$

dove a è la lunghezza di diffusione e r_0 il raggio di interazione efficace. Sostituendo questo sviluppo nella (2.33) si ottiene

$$\psi_\infty(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 1 + \frac{\tan \eta_0}{kr} = 1 - \frac{a}{r} \quad (2.35)$$

da cui si ottiene

$$r\psi_\infty(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r - a \quad (2.36)$$

A questo punto è facile capire il significato della lunghezza di diffusione a : come si può vedere dalla Fig. 2.1, questa è l'intercetta della funzione d'onda asintotica $r\psi_\infty(r)$ sull'ascissa. Nel caso del potenziale della sfera rigida la lunghezza di diffusione è il diametro della sfera. In generale a può essere sia positivo che negativo, a seconda che il potenziale sia prevalentemente repulsivo o attrattivo.

2.1.3 Problema a N corpi

Dopo aver introdotto gli pseudopotenziali nel problema a due corpi possiamo ora discutere la generalizzazione al problema a N corpi.

Consideriamo innanzitutto il problema a N corpi interagenti come sfere rigide, e definiamo $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. L'equazione di Schrödinger del sistema è

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \dots + \nabla_N^2)\Psi = E\Psi & \text{se } r_{ij} > a \text{ per } i \neq j \\ \Psi = 0 & \text{se } r_{ij} \leq a \text{ per } i \neq j \end{cases} \quad (2.37)$$

dove la funzione d'onda $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ è funzione di tutte le coordinate. L'interazione di tipo sfera rigida è equivalente ad una condizione al contorno

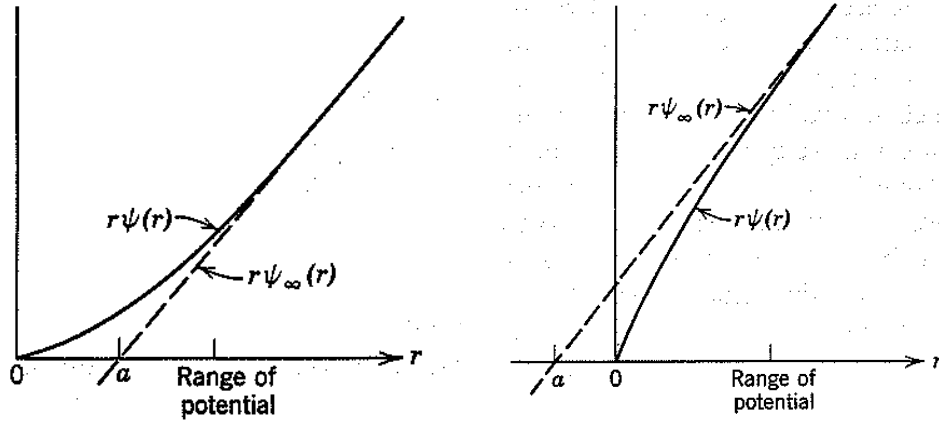


Figura 2.1: Funzioni d'onda per un potenziale con lunghezza di scattering positiva (a sinistra) o negativa (a destra) *Figura tratta da [1] (fig. 10.3 e 10.4).*

che richieda l'annullamento della funzione d'onda per $r_{ij} \leq a$ per tutti gli $i \neq j$. Nello spazio delle configurazioni $3N$ -dimensionale l'insieme dei punti che per cui $r_{ij} = a$ rappresenta una ipersuperficie della forma di un "cilindro" (con le coordinate diverse da \vec{r}_i e \vec{r}_j libere di variare); in tutto ci sono $N(N-1)/2$ di questi "cilindri" che si intersecano in modo complicato dando luogo ad una struttura ad "albero" (Fig. 2.2).

Analogamente a quanto fatto prima, si può sostituire l'effetto di ogni cilindro con multipoli lungo gli assi equivale ad introdurre degli pseudopotenziali a due corpi descritti nel paragrafo precedente. Tuttavia questi non danno il corretto andamento di Ψ in prossimità dell'intersezione di due o più cilindri, che corrispondono ad urti a più corpi di cui non si tiene conto degli pseudopotenziali a due corpi. Per avere il giusto comportamento anche nelle zone di intersezione è quindi necessario introdurre degli pseudopotenziali a tre o più corpi che devono essere ricavati risolvendo il problema corrispondente. La dipendenza di questi pseudopotenziali da a , diametro della sfera rigida, può però essere facilmente ricavata da considerazioni dimensionali.

Ad esempio lo pseudopotenziale a tre corpi deve apparire nell'equazione di Schödinger a tre corpi nella forma

$$\begin{aligned}
 & (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2 + k^2)\Psi \\
 & = \sum (\text{pseudopotenziali a 2 corpi}) + \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_3)K\Psi
 \end{aligned}$$

La quantità K dovrà avere le dimensioni di una lunghezza alla quarta potenza. A basse energie, cioè per $k \rightarrow 0$, l'unica lunghezza del problema è a e quindi K deve essere dell'ordine di a^4 . Allo stesso modo si possono trovare le dimensioni degli pseudopotenziali di ordine superiore.

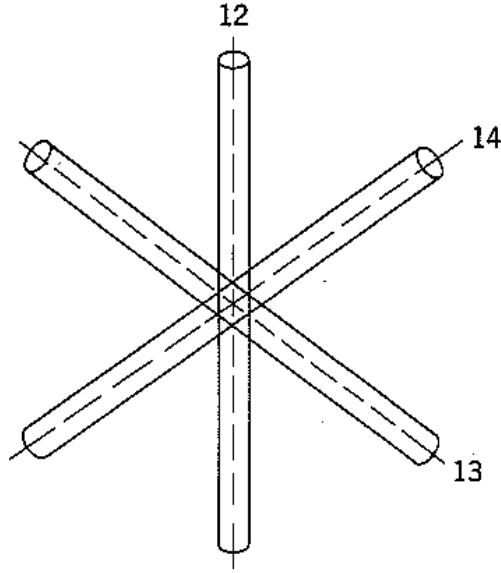


Figura 2.2: Rappresentazione schematica dello spazio delle configurazione a $3N$ dimensioni. L'interazione tra sfere rigide è equivalente a condizioni al contorno nulle per la funzione d'onda sulla superficie dei cilindri. *Figura tratta da [1] (fig. 10.5).*

Queste considerazioni continuano a valere anche se il potenziale tra particelle non è quello della sfera rigida, ma un potenziale generico a raggio d'azione finito che non abbia stati legati. Inoltre gli pseudopotenziali che coinvolgono più di due particelle possono essere ignorati se si è interessati ad un'accuratezza all'ordine a (per un potenziale interatomico generico, a^2 per le sfere rigide).

In definitiva quindi (ricordando la 2.24 e tenendo conto che la massa ridotta del sistema a due corpi è $\mu = m/2$), l'hamiltoniana efficace per un gas interagente di N particelle identiche di massa m si può scrivere come

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \dots + \nabla_N^2) + \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \sum_{i < j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \frac{\partial}{\partial r_{ij}} r_{ij} \quad (2.39)$$

dove a è la lunghezza di diffusione.

Osserviamo che l'operatore hamiltoniano definito sopra non è hermitiano a causa del termine di derivata nello pseudopotenziale; questo riflette il fatto che le autofunzioni di H non coincidono dappertutto con le autofunzioni del sistema reale, ma solo nella regione asintotica (lontano dall'origine). Tuttavia, se la funzione d'onda non ha divergenze per $r_{ij} \rightarrow 0$ (notare la presenza

della delta di Dirac), abbiamo

$$\left(\frac{\partial}{\partial r}r\psi\right)\Big|_{r=0} = \psi(0) + r\left(\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)\Big|_{r=0} = \psi(0) \quad (2.40)$$

e possiamo quindi trascurare il termine di derivata

$$\frac{\partial}{\partial r_{ij}}r_{ij} \sim 1 \quad (2.41)$$

Questo è il caso che si ha per esempio quando l'interazione produce una piccola perturbazione rispetto alle funzione d'onda del sistema libero, che è regolare in $r = 0$.

Nel seguito noi supporremo che queste condizioni siano soddisfatte e utilizzeremo quindi come hamiltoniana di riferimento per il sistema ad N corpi la seguente espressione

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \dots + \nabla_N^2) + \frac{4\pi a\hbar^2}{m} \sum_{i<j} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (2.42)$$

in cui compare un potenziale di contatto a due corpi, caratterizzato dalla *lunghezza di scattering* a (più un eventuale potenziale esterno).

Bibliografia

- [1] K. Huang, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, second edition, Wiley (1987), pag. 230.
- [2] K. Huang and C. N. Yang, *Quantum-mechanical many-body problem with hard-sphere interaction*, Phys. Rev. **105**, 767 (1957).

Capitolo 3

La teoria di Gross-Pitaevskii

In questo capitolo partiremo dai risultati dei capitoli precedenti per introdurre la teoria che descrive i condensati di Bose-Einstein. In particolare quindi consideriamo un sistema di N bosoni con interazioni a due corpi, nell'ipotesi di gas diluito ($(N/V)a^3 \ll 1$), in cui il potenziale di interazione assume la forma

$$v(\vec{r} - \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \text{con} \quad g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (3.1)$$

dove a è la *lunghezza di scattering* e m la massa degli atomi del gas. Nella formulazione della teoria dei campi, l'hamiltoniana che descrive il nostro sistema può essere scritta così:

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{g}{2} \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}). \quad (3.2)$$

L'evoluzione temporale dell'operatore di campo è determinata dall'equazione di Heisenberg:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{H}] \quad (3.3)$$

che può essere messa in forma esplicita calcolando il commutatore (ricordando la (1.5)). Per quanto riguarda il contributo del termine cinetico e del potenziale, si ottiene

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (3.4)$$

mentre per la parte delle interazioni si ha

$$\begin{aligned} & \left[\hat{\psi}(\vec{r}), \frac{g}{2} \int d\vec{r}' \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}^2(\vec{r}') \right] = \\ & = \frac{g}{2} \int d\vec{r}' \left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \right] \hat{\psi}^2(\vec{r}') = \\ & = g\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^2(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Utilizzando le (3.4) e (3.5), l'equazione di Heisenberg (3.3) diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + g \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\psi}(\vec{r}, t) \right] \hat{\psi}(\vec{r}, t) \quad (3.6)$$

3.1 L'equazione di Gross-Pitaevskii

Arrivati a questo punto passeremo dalla teoria quantistica dei campi ad una teoria semiclassica, ottenuta introducendo il valore medio quantistico (valore d'aspettazione sullo stato quantistico del sistema), $\phi = \langle \hat{\psi} \rangle$. In generale possiamo scrivere

$$\hat{\psi} = \langle \hat{\psi} \rangle + \delta \hat{\psi} \quad (3.7)$$

dove il termine $\delta \hat{\psi}$ rappresenta le fluttuazioni quantistiche, e per definizione risulta $\langle \delta \hat{\psi} \rangle = 0$.

Come sappiamo dalla Meccanica Statistica, un sistema di bosoni a basse temperature presenta il fenomeno della condensazione di Bose-Einstein, caratterizzato da un'occupazione macroscopica dello stato fondamentale. La transizione verso questa nuova fase è associata alla comparsa di un *parametro d'ordine* diverso da zero, che nella formulazione statistica della Teoria dei Campi è proprio il valore medio ϕ del campo che rappresenta anche la funzione d'onda del condensato. Analogamente a quanto visto precedentemente, questo è un oggetto che non descrive le particelle del condensato singolarmente, bensì il comportamento collettivo di tutto il sistema. Il termine di fluttuazione $\delta \hat{\psi}$ è invece associato alle particelle non condensate. Per temperature molto basse il contributo di queste ultime può, in prima approssimazione, essere trascurato (approssimazione di *campo medio*).

In definitiva, effettuando la sostituzione $\hat{\psi}(\vec{r}, t) \rightarrow \phi(\vec{r}, t)$ nell'equazione (3.6) otteniamo l'equazione di Gross-Pitaevskii (GPE)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r}, t)|^2 \right] \phi(\vec{r}, t)} \quad (3.8)$$

che è una equazione di Schrödinger *non-lineare* (dove il termine non-lineare è legato alle interazioni tra le particelle) che descrive l'evoluzione temporale della funzione d'onda del condensato $\phi(\vec{r}, t)$. Quest'ultima è legata alla densità di probabilità spaziale semplicemente da

$$\rho(\vec{r}, t) = |\phi(\vec{r}, t)|^2 \quad (3.9)$$

che è una quantità misurabile direttamente negli esperimenti.

Ricordando la definizione dell'operatore numero

$$\hat{N} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (3.10)$$

nell'approssimazione di campo medio abbiamo (ricordiamo che $\langle \delta\hat{\psi} \rangle = 0$)

$$\begin{aligned}\langle \hat{N} \rangle &= \int d\vec{r} \langle (\phi + \delta\hat{\psi})^\dagger (\phi + \delta\hat{\psi}) \rangle \\ &= \int d\vec{r} (|\phi|^2 + \langle \delta\hat{\psi}^\dagger \delta\hat{\psi} \rangle) \\ &\approx \int d\vec{r} \rho(\vec{r}, t) = N\end{aligned}\quad (3.11)$$

dove N è il numero di particelle del condensato, consistentemente con quanto abbiamo discusso fino ad ora. Per comodità la funzione d'onda del condensato può anche essere normalizzata ad uno, riscalandola opportunamente $\phi \rightarrow \sqrt{N}\phi$; questo modifica anche il termine di interazione, $g \rightarrow Ng$. Questa scelta ci sarà utile in seguito.

L'equazione di Gross-Pitaevskii può anche essere ricavata tramite un principio variazionale

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \frac{\partial E}{\partial \phi^*} \quad (3.12)$$

dal funzionale energia E

$$E[\phi] = \int d\vec{r} \left\{ \phi^*(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, t) + \frac{g}{2} |\phi(\vec{r}, t)|^4 \right\} \quad (3.13)$$

$$= \int d\vec{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\vec{r}, t)|^2 + V(\vec{r}) |\phi(\vec{r}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\phi(\vec{r}, t)|^4 \right\} \quad (3.14)$$

dove il primo termine rappresenta l'energia cinetica E_{kin} , il secondo l'energia potenziale E_{pot} , ed il terzo l'energia di interazione E_{int} .

Si definisce anche la quantità $E_{rel} = E_{kin} + E_{int}$ che prende il nome di *release energy* (energia di rilascio), che corrisponde all'energia disponibile durante l'espansione in seguito allo spegnimento del potenziale di trappola (questo è un ingrediente essenziale negli esperimenti dove l'*imaging* del condensato viene fatto dopo un certo tempo di volo, o *time-of-flight*).

3.2 L'equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria

Passiamo ora a discutere lo stato fondamentale del sistema. Questo si ottiene cercando una soluzione stazionaria della forma:

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-i\mu t/\hbar} \quad (3.15)$$

che, sostituita nell'equazione (3.8), dà luogo all'equazione di Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r})|^2 \right] \phi(\vec{r}) = \mu \phi(\vec{r})} \quad (3.16)$$

In questa equazione μ è il potenziale chimico, cioè l'energia necessaria per aggiungere un atomo al condensato, ed è diverso dall'energia totale del sistema. Moltiplicando a sinistra per ϕ^* e integrando in $d\vec{r}$ si ottiene infatti

$$E_{kin} + E_{pot} + 2E_{int} = \mu N \quad (3.17)$$

da cui

$$\mu = \frac{E_{kin} + E_{pot} + 2E_{int}}{N} = \frac{E}{N} + \frac{E_{int}}{N} \quad (3.18)$$

dove

$$E = E_{kin} + E_{pot} + E_{int} \quad (3.19)$$

è l'energia totale definita sopra. Il potenziale chimico μ quindi differisce dall'energia totale per particella E/N per un termine pari all'energia di interazione per particella, e questa differenza è dovuta al fatto che l'equazione di Gross-Pitaevskii è non lineare. (Nel caso non interagente, $g = 0$, l'equazione di Gross-Pitaevskii si riduce all'equazione di Schrödinger lineare).

Osserviamo anche che la dipendenza di E da N può essere resa esplicita riscaldando opportunamente il parametro d'ordine come abbiamo accennato in precedenza, $\phi \rightarrow \sqrt{N}\phi$

$$\begin{aligned} E[\phi] &= N \int d\vec{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\phi|^2 + V(\vec{r}) |\phi|^2 + N^2 \frac{g}{2} \int d\vec{r} |\phi|^4 \right\} \\ &\equiv NE_0 + N^2 I \end{aligned} \quad (3.20)$$

da cui è facile verificare (dalla (3.18) si ha $\mu = E_0 + 2NI$) che vale

$$\frac{\partial E}{\partial N} = \mu \quad (3.21)$$

consistentemente con l'interpretazione termodinamica di μ come energia necessaria per aggiungere una particella al condensato.

Facciamo ora qualche considerazione su g . Innanzitutto ricordiamo che

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (3.22)$$

A seconda del segno della lunghezza di scattering a si ha una interazione attrattiva ($a < 0$) o repulsiva ($a > 0$). In particolare, per $a < 0$ l'interazione tende a concentrare tutti gli atomi in una regione limitata di spazio, sempre più piccola quanto più è forte l'attrazione. Questo è possibile fino ad un certo valore critico, che identifica la condizione per cui non esiste più una soluzione normalizzabile dell'equazione (3.16). Dal punto di vista fisico, in questa situazione anche le interazioni a tre corpi diventano importanti ed a causa di esse si ha una perdita di atomi del condensato.

Nel seguito della discussione considereremo sempre il caso $a > 0$.

3.2.1 Il potenziale armonico

Uno dei potenziali più tipici utilizzati negli esperimenti con i condensati è un potenziale armonico del tipo

$$V_{ho} = \frac{1}{2}m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 \quad (3.23)$$

ed è inoltre utile definire $\omega_{ho} = \sqrt[3]{\omega_x \omega_y \omega_z}$.

Nel caso il cui il sistema ha una simmetria cilindrica ($\omega_x = \omega_y \equiv \omega_\perp$) il potenziale può essere scritto come

$$V_{ho} = \frac{1}{2}m\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 \quad (3.24)$$

mentre nel caso di simmetria sferica si semplifica ulteriormente ponendo $\omega_\perp = \omega_z = \omega_{ho}$

$$V_{ho} = \frac{1}{2}m\omega_{ho}^2 r^2. \quad (3.25)$$

Per semplificare la risoluzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii è possibile passare a variabili adimensionali; consideriamo per semplicità il caso di simmetria sferica e definiamo

$$a_{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}} \quad (3.26)$$

che rappresenta la lunghezza caratteristica dell'oscillatore armonico. Introduciamo quindi la variabile adimensionale $\tilde{r} = r/a_{ho}$ e riscriviamo l'equazione (3.16) come segue

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{a_{ho}^2} \nabla_{\tilde{r}}^2 + \frac{1}{2}m\omega_{ho}^2 a_{ho}^2 \tilde{r}^2 + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N}{a_{ho}^3} |\tilde{\phi}|^2 \right] \tilde{\phi} = \mu \tilde{\phi} \quad (3.27)$$

dove la $\tilde{\phi}$ è tale che

$$|\tilde{\phi}|^2 = \frac{a_{ho}^3}{N} |\phi|^2 \quad (3.28)$$

in modo da essere normalizzata ad uno.

Semplificando e dividendo entrambi i termini per $\hbar\omega_{ho}$, equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria assume la seguente forma adimensionale

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_{\tilde{r}}^2 + \frac{1}{2} \tilde{r}^2 + 4\pi \frac{Na}{a_{ho}} |\tilde{\phi}|^2 \right] \tilde{\phi} = \tilde{\mu} \tilde{\phi} \quad (3.29)$$

con $\tilde{\mu} = \mu/\hbar\omega_{ho}$.

3.2.2 Il limite Thomas-Fermi

Nel caso in cui il termine di interazione sia predominante su quello cinetico - il cosiddetto limite di Thomas-Fermi - l'equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria (3.16) può essere ulteriormente semplificata trascurando appunto il termine cinetico

$$[V(\vec{r}) + g |\phi(\vec{r})|^2] \phi(\vec{r}) = \mu \phi(\vec{r}) \quad (3.30)$$

da cui si può ricavare la forma della distribuzione spaziale del condensato

$$|\phi|^2 = g^{-1} (\mu - V_{ho}(\vec{r})) = \frac{\mu}{g} \left(1 - \sum_i \frac{m\omega_i^2}{2\mu} r_i^2 \right) \quad (3.31)$$

che è l'equazione di un paraboloide. Conviene inoltre definire il raggio di Thomas-Fermi nella direzione i -esima come

$$R_i^{TF} = \sqrt{\frac{2\mu}{m\omega_i^2}} \quad (3.32)$$

per cui la distribuzione di densità assume la forma

$$|\phi|^2 = \frac{\mu}{g} \left(1 - \sum_i \left(\frac{r_i}{R_i^{TF}} \right)^2 \right). \quad (3.33)$$

In Fig. 3.1 è mostrato come il profilo della funzione d'onda si modifica passando dal caso non interagente ($a = 0$, profilo gaussiano) al limite TF dove la forte interazione repulsiva tra gli atomi provoca un allargamento del condensato, caratterizzato da un profilo parabolico. In realtà il profilo non è perfettamente parabolico, in quanto la distribuzione mantiene delle code.

Nel limite TF il potenziale chimico si ottiene analiticamente dalla condizione di normalizzazione, come mostrato qui sotto.

$$N = \int d^3r |\phi|^2 = \frac{\mu}{g} \int d^3r \left(1 - \sum_i \left(\frac{r_i}{R_i^{TF}} \right)^2 \right) \quad (3.34)$$

$$= \frac{\mu}{g} \prod_i R_i^{TF} \int d^3\xi \left(1 - \sum_i \xi_i^2 \right) \quad (3.35)$$

$$= \left(\frac{2\mu}{\hbar\omega_{ho}} \right)^2 \frac{a_{ho}}{15a} \quad (3.36)$$

Nel limite TF abbiamo quindi

$$\mu = \frac{\hbar\omega_{ho}}{2} \left(15N \frac{a}{a_{ho}} \right)^{2/5} \propto N^{2/5} \quad (3.37)$$

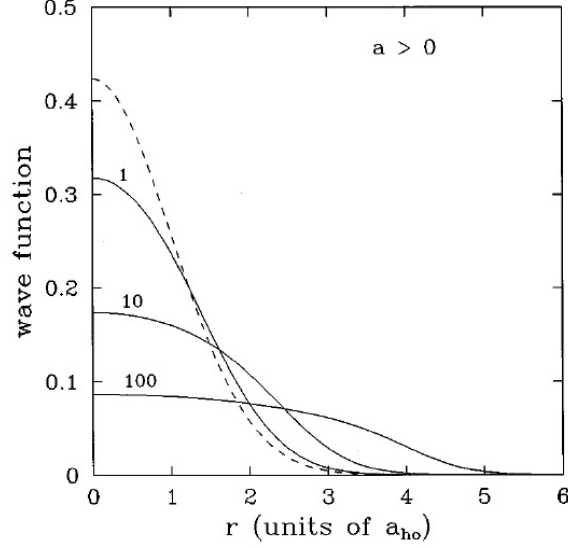


Figura 3.1: Profilo di densità del condensato nel passare dal caso non interagente ($a = 0$, linea tratteggiata) al limite Thomas-Fermi ($a \gg 1$). *Figura tratta da [1] (fig. 9).*

da cui, ricordando che $\mu = \partial E / \partial N$, si ha

$$E = \int \mu dN = \frac{5}{7} N \mu \quad (3.38)$$

ed inoltre ($E_{int} = \mu N - E$)

$$E_{int} = E_{rel} = \frac{2}{7} N \mu \quad (3.39)$$

Healing Length

Un'altra lunghezza caratteristica del condensato è la cosiddetta *healing length* ξ . Questa si ottiene considerando un condensato con densità uniforme n , ed imponendo che la densità vada a zero in un punto arbitrario (questa è per esempio la situazione che si ha ai bordi di un contenitore). La *healing length* rappresenta la distanza su cui la densità ritorna da zero al valore uniforme n , e può essere ottenuta considerando l'equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + g |\phi(\vec{r})|^2 \right] \phi(\vec{r}) = \mu \phi(\vec{r}) \quad (3.40)$$

e comparando il termine di energia cinetica e quello di interazione. Per un sistema uniforme la soluzione di questa equazione è $\phi = \sqrt{n}$, con potenziale chimico $\mu = gn$ (a cui contribuisce solo l'energia di interazione perché quella cinetica è nulla). Quando introduciamo gli effetti ai bordi, dove il termine di

interazione si annulla, l'energia mancante deve essere compensata dal termine cinetico. Possiamo quindi scrivere

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \approx \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} = gn = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}n \quad (3.41)$$

da cui risulta

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi na}}. \quad (3.42)$$

La *healing length* rappresenta la scala di lunghezza caratteristica associata al campo medio (il termine di interazione).

3.3 Formulazione idrodinamica

In questa sezione vedremo che l'equazione di Gross-Pitaevskii può essere ricondotta a due equazioni ben note, cioè l'equazione di continuità e l'equazione di Eulero per un superfluido. Per ricavarle, possiamo riscrivere la funzione d'onda del condensato nella rappresentazione modulo-fase

$$\phi = \sqrt{n}e^{iS} \quad (3.43)$$

dove la densità n e la fase S sono entrambe funzioni di \vec{r} e t , $n = n(\vec{r}, t)$ e $S = S(\vec{r}, t)$. In particolare la fase è legata alla velocità. Infatti

$$\begin{aligned} \vec{j} &= n\vec{v} = \frac{\hbar}{2im} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) = \\ &= \frac{\hbar}{2im} [\sqrt{n}e^{-iS} (\nabla \sqrt{n})e^{iS} + \sqrt{n}i(\nabla S)e^{iS}] - c.c. \\ &= \frac{\hbar}{2im} [\sqrt{n}(\nabla \sqrt{n}) + ni(\nabla S) - c.c.] \\ &= \frac{\hbar}{m} n \nabla S \end{aligned} \quad (3.44)$$

da cui semplicemente:

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S \quad (3.45)$$

Vediamo ora come si trasforma l'equazione di Gross-Pitaevskii dipendente dal tempo in eq. (3.8), che riscriviamo qui sotto

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V\phi + g|\phi|^2 \phi; \quad (3.46)$$

utilizzando la forma di ϕ in (3.43), il primo membro diventa

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \sqrt{n} \right) e^{iS} - \hbar \sqrt{n} \left(\frac{\partial}{\partial t} S \right) e^{iS}, \quad (3.47)$$

mentre per il secondo membro abbiamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla [(\nabla \sqrt{n}) e^{iS} + i(\nabla S) \sqrt{n} e^{iS}] = -\frac{\hbar^2}{2m} e^{iS} [(\nabla^2 \sqrt{n}) + i(\nabla S)(\nabla \sqrt{n}) + i(\nabla^2 S) \sqrt{n} + i(\nabla S)(\nabla \sqrt{n}) - (\nabla S)^2 \sqrt{n}]. \quad (3.48)$$

Gli altri due termini contengono il potenziale esterno di interazione e il potenziale interatomico

$$V \sqrt{n} e^{iS} + gn \sqrt{n} e^{iS}. \quad (3.49)$$

A questo punto uguagliando le parti reali ed immaginarie dei due membri dell'equazione di Gross-Pitaevskii, si ottengono due equazioni che devono essere soddisfatte contemporaneamente

$$\begin{cases} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{n} = -\frac{\hbar^2}{2m} (2(\nabla \sqrt{n}) \nabla S + \sqrt{n} \nabla^2 S) & (3.50) \\ -\hbar \sqrt{n} \frac{\partial}{\partial t} S = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \sqrt{n} - \sqrt{n} (\nabla S)^2) + V \sqrt{n} + gn \sqrt{n} & (3.51) \end{cases}$$

Dalla (3.50), semplificando \hbar e moltiplicando entrambi i membri per \sqrt{n} , si ottiene

$$\begin{aligned} \sqrt{n} \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{n} + \frac{\hbar}{2m} (2\sqrt{n} (\nabla \sqrt{n}) \nabla S + n \nabla^2 S) &= 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{n} \sqrt{n}) + \frac{\hbar}{2m} \left(2 \frac{1}{2} (\nabla \sqrt{n} \sqrt{n}) \nabla S + n \nabla^2 S \right) &= 0 \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} ((\nabla n) \nabla S + n \nabla^2 S) &= 0 \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} \nabla (n \nabla S) &= 0 \\ \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla (n \vec{v}) &= 0 \end{aligned} \quad (3.52)$$

che è l'equazione di continuità.

Dalla (3.51) invece si ha, moltiplicando per \sqrt{n}

$$\begin{aligned} n \hbar \frac{\partial}{\partial t} S - \frac{\hbar^2}{2m} (\sqrt{n} \nabla^2 \sqrt{n} - n (\nabla S)^2) + Vn + gn^2 &= 0 \\ \hbar \frac{\partial}{\partial t} S - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\sqrt{n} (\nabla^2 \sqrt{n})}{n} - (\nabla S)^2 \right) + V + gn &= 0 \end{aligned}$$

e facendone il gradiente

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \nabla S + \nabla \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\sqrt{n} (\nabla^2 \sqrt{n})}{n} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla S)^2 + V + gn \right] = 0$$

ricordando che $\nabla S = (m/\hbar)\vec{v}$ si ottiene infine

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{v} + \frac{1}{m}\nabla \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\nabla^2 \sqrt{n})}{\sqrt{n}} + \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + V + gn \right] = 0 \quad (3.53)$$

che è analoga all'equazione idrodinamica di Eulero di fluido ideale senza viscosità (un *superfluido*)

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{v} = -\frac{1}{mn}\nabla p - \frac{1}{2}\nabla\vec{v}^2 - \frac{1}{m}\nabla V \quad (3.54)$$

dove il termine di pressione p contiene il contributo delle interazioni $gn^2/2$ ed un contributo puramente quantistico $-(\hbar^2/2m)(\nabla^2 \sqrt{n})/\sqrt{n}$, detto *pressione quantistica*. Osserviamo che la (3.54) è scritta qui per il caso $\nabla \times \vec{v} = 0$ ($\nabla \times \nabla S = 0$).

Riassumendo quindi, nella formulazione idrodinamica l'equazione di Gross-Pitaevskii (3.8) è equivalente al sistema di equazioni (3.52) e (3.53)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla(n\vec{v}) = 0 \end{array} \right. \quad (3.55)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{\partial}{\partial t}\vec{v} + \nabla \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\nabla^2 \sqrt{n})}{\sqrt{n}} + \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + V + gn \right] = 0 \end{array} \right. \quad (3.56)$$

Bibliografia

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [2] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 2008).

Capitolo 4

Equazioni di scaling

In questo capitolo prenderemo in considerazione la classe di soluzioni dell'equazione di Gross-Pitaevskii - o equivalentemente delle equazioni idrodinamiche - che presentano un comportamento di *scaling*. Tali soluzioni corrispondono ad avere una distribuzione di densità che mantiene la stessa forma funzionale dalle coordinate spaziale, che vengono però riscalate tramite dei fattori di scala dipendenti dal tempo. Questo approccio risulta applicabile nel limite non-interagente ed in quello opposto di Thomas-Fermi, nel caso di confinamento armonico con frequenze dipendenti dal tempo, ed è utile per studiare le piccole oscillazioni (ottenute modulando o cambiando istantaneamente le frequenze di confinamento) o per l'espansione libera (assenza di confinamento).

4.1 Scaling delle equazioni idrodinamiche

Iniziamo considerando il caso di un condensato confinato in un potenziale armonico dipendente dal tempo, della forma

$$V(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}m \sum_{i=1}^3 \omega_i^2(t)r_i^2 ; \quad (4.1)$$

supporremo anche che all'istante iniziale il condensato abbia un profilo Thomas-Fermi

$$n_0(\vec{r}) = \frac{\mu - V_0(\vec{r})}{g}. \quad (4.2)$$

In questo caso, come verificheremo in seguito, una buona ipotesi di scaling per la densità corrisponde a richiedere

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{\prod_j \lambda_j} n_0 \left(\frac{r_i}{\lambda_i(t)} \right) \quad (4.3)$$

in cui la dipendenza dal tempo è contenuta solo nei coefficienti $\lambda_i(t)$ che riscaldano le coordinate (il fattore contenente la produttoria serve a conservare la normalizzazione). Inseriamo adesso questa ipotesi nell'equazione di continuità (3.52); per il termine di derivata temporale si ha

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \sum_j \left(-\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} \frac{1}{\prod_i \lambda_i} n_0 + \frac{1}{\prod_i \lambda_i} \frac{\partial n_0}{\partial(r_j/\lambda_j)} \frac{r_j}{\lambda_j^2} (-\dot{\lambda}_j) \right) \\ &= -\frac{1}{\prod_i \lambda_i} \sum_j \frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} \left(n_0 + r_j \frac{\partial n_0}{\partial r_j} \right)\end{aligned}\quad (4.4)$$

mentre per il termine di gradiente

$$\begin{aligned}\nabla(n\vec{v}) &= \nabla n \cdot \vec{v} + n \nabla \cdot \vec{v} = \sum_j [(\nabla_j n) v_j + n(\nabla_j v_j)] = \\ &= \frac{1}{\prod_i \lambda_i} \sum_j [(\nabla_j n_0) v_j + n_0(\nabla_j v_j)]\end{aligned}\quad (4.5)$$

dove il simbolo ∇_j indica la derivata rispetto a r_j .

Globalmente, dall'equazione di continuità si ottiene quindi

$$\frac{1}{\prod_i \lambda_i} \sum_j \left[\left(-\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} + \nabla_j v_j \right) n_0 + \left(-\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} r_j + v_j \right) \nabla_j n_0 \right] = 0 \quad (4.6)$$

che è soddisfatta se il campo di velocità soddisfa il seguente scaling

$$v_j(\vec{r}, t) = \frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} r_j; \quad (4.7)$$

questa equazione completa l'ipotesi di scaling. Osserviamo che fino ad ora non abbiamo utilizzato né l'ipotesi di potenziale armonico (4.1) né quella del profilo Thomas-Fermi (4.2). Lo scaling della velocità risulta solo dall'ipotesi di scaling sulla densità e dall'equazione di continuità.

Vediamo ora che cosa si ricava dall'equazione di Eulero (3.54); per il termine di derivata temporale abbiamo

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = m r_j \left(\frac{\ddot{\lambda}_j}{\lambda_j} - \frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2} \right) \quad (4.8)$$

mentre per quello di energia cinetica

$$\begin{aligned}\nabla_j \frac{1}{2} m \vec{v}^2 &= m \vec{v} \nabla_j \vec{v} = m \sum_k v_k \nabla_j v_k \\ &= m \sum_k x_k \frac{\dot{\lambda}_k}{\lambda_k} \delta_{kj} \frac{\dot{\lambda}_k}{\lambda_k} = \\ &= m r_j \frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2}\end{aligned}\quad (4.9)$$

Per gli altri due termini occorre utilizzare esplicitamente sia l'ipotesi di potenziale armonico (4.1)

$$\nabla V(\vec{r}) = m\omega_j^2 r_j \quad (4.10)$$

che quella del profilo Thomas-Fermi (4.2)

$$\begin{aligned} g\nabla n &= \frac{g}{\prod_i \lambda_i} \nabla_j n_0 \left(\frac{r_i}{\lambda_i} \right) = \\ &= \frac{g}{\prod_i \lambda_i} \frac{1}{g} \nabla_j \left(\mu - \frac{1}{2} m \sum_k \omega_k^2(0) \frac{x_k^2}{\lambda_k^2} \right) = \\ &= -\frac{mr_j}{\prod_i \lambda_i} \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Dalla (3.54) si ha quindi

$$mr_j \left(\frac{\ddot{\lambda}_j}{\lambda_j} - \frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2} + \frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2} - \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^2 \prod_i \lambda_i} + \omega_j^2(t) \right) = 0 \quad (4.12)$$

da cui si ottiene l'equazione per i coefficienti di scaling $\lambda_j(t)$

$$\boxed{\ddot{\lambda}_j(t) = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j \prod_i \lambda_i} - \omega_j^2(t) \lambda_j} \quad (4.13)$$

Nota: soluzioni di scaling possono essere ottenute anche in situazioni più complesse, per un potenziale quadratico del tipo:

$$V(\vec{r}, t) = m\omega_{ho}^2 \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} r_i U_{ij}(t) r_j - \sum_i u_i(t) r_i + u_0(t) \right]. \quad (4.14)$$

In questo caso occorre fare un'ipotesi analoga per lo scaling della densità $n(\vec{r}, t)$ e della fase $S(\vec{r}, t)$ (o equivalentemente della velocità $v(\vec{r}, t)$), scrivendo

$$n(\vec{r}, t) \propto \frac{1}{2} - \sum_{i,j} r_i A_{ij}(t) r_j + \sum_i a_i(t) r_i + n_0(t) \quad (4.15)$$

$$S(\vec{r}, t) \propto -\frac{1}{2} \sum_{i,j} r_i B_{ij}(t) r_j + \sum_i b_i(t) r_i + s_0(t). \quad (4.16)$$

4.2 Scaling dell'equazione di Gross-Pitaevskii

Le equazioni di scaling possono anche essere ricavate direttamente dall'equazione di Gross-Pitaevskii. Nel caso appena considerato è naturale considerare la seguente espressione per la funzione d'onda

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\prod_j \lambda_j(t)}} \psi_0 \left(\frac{r_i}{\lambda_i(t)}, t \right) e^{i \frac{m}{2\hbar} \sum_j \frac{\dot{\lambda}_j(t)}{\lambda_j(t)} r_j^2 - i\beta(t)} \quad (4.17)$$

dove in ψ_0 abbiamo lasciato una dipendenza esplicita da t ed abbiamo supposto uno scaling delle coordinate che deriva direttamente da quello per la densità, mentre per il termine di fase lo scaling è quello del campo di velocità che abbiamo ricavato prima, dove si è tenuto conto della relazione $\vec{v} = (\hbar/m)\nabla S(\vec{r})$. Questo termine di fase definisce una trasformazione di gauge locale (dipende dalle coordinate spaziali) che corrisponde al seguente *shift* dell'operatore di impulso $\hat{P} = -i\hbar\nabla$, a cui viene sottratto l'impulso locale (che si avrebbe anche per un gas classico [2])

$$\hat{P} \rightarrow \hat{P} + m\vec{v} \quad (4.18)$$

Infatti

$$\begin{aligned} -i\hbar\nabla\psi_0 e^{iS} &= (-i\hbar\nabla\psi_0)e^{iS} + \psi_0(\hbar\nabla S)e^{iS} \\ &= e^{iS}(-i\hbar\nabla + \hbar\nabla S)\psi_0 = e^{iS}(-i\hbar\nabla + m\vec{v})\psi_0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

e quindi, per $\psi_0 \rightarrow \psi_0 e^{iS}$

$$\langle \hat{P} \rangle_{\psi_0} \rightarrow \langle \hat{P} + m\vec{v} \rangle_{\psi_0}. \quad (4.20)$$

Osserviamo che nella (4.17) compare anche una fase $\beta(t)$ dipendente solo dal tempo, da fissare in modo opportuno tramite l'equazione di Gross-Pitaevskii. Procediamo quindi al calcolo esplicito, inserendo la (4.17) nella (3.8). Per il termine di derivata rispetto al tempo abbiamo (utilizzando notazioni sintetiche per brevità)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= \left(i\hbar\partial_t \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}} \right) \psi_0 e^{iS-i\beta} + \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}} (i\hbar D_t \psi_0) e^{iS-i\beta} \\ &\quad - \hbar \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}} \psi_0 (\dot{S} - \dot{\beta}) e^{iS-i\beta} \\ &= \left[\left(i\hbar \sum_j -\frac{1}{2} \frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j} \frac{\prod_{k \neq j} \lambda_k}{(\prod\lambda)^{3/2}} \right) \psi_0 + \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}} \left(-i\hbar \sum_j \frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j^2} r_j \tilde{\nabla}_j \psi_0 + i\hbar\partial_t \psi_0 \right) \right. \\ &\quad \left. - \hbar \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}} \psi_0 \left(\frac{m}{2\hbar} \sum_j \left(\frac{\ddot{\lambda}_j}{\lambda_j} - \frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2} \right) r_j^2 - \dot{\beta} \right) \right] e^{iS-i\beta} \end{aligned} \quad (4.21)$$

mentre per il laplaciano

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}}\nabla\{(\nabla\psi_0+\psi_0i\nabla S)e^{iS-i\beta}\} \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}}\{\nabla^2\psi_0+2i\nabla\psi_0\cdot\nabla S+\psi_0i\nabla^2S-\psi_0(\nabla S)^2\}e^{iS-i\beta} \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}}\left\{\left(\sum_j\frac{1}{\lambda_j^2}\tilde{\nabla}_j^2\psi_0\right)+2i\sum_j\frac{1}{\lambda_j}\left(\tilde{\nabla}_j\psi_0\right)\frac{m\dot{\lambda}_j}{\hbar\lambda_j}r_j\right. \\
&\quad\left.+i\psi_0\frac{m}{\hbar}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j}-\psi_0\sum_j\left(\frac{m\dot{\lambda}_j}{\hbar\lambda_j}r_j\right)^2\right\}e^{iS-i\beta} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\prod\lambda}}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_j\frac{1}{\lambda_j^2}\tilde{\nabla}_j^2\psi_0-i\hbar\sum_j\frac{1}{\lambda_j}\left(\tilde{\nabla}_j\psi_0\right)\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j}r_j\right. \\
&\quad\left.-i\psi_0\frac{\hbar}{2}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j}+\psi_0\frac{m}{2}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2}r_j^2\right\}e^{iS-i\beta} \tag{4.22}
\end{aligned}$$

ed infine

$$V(\vec{r})+g|\psi(\vec{r},t)|^2=\frac{1}{2}m\sum_j\omega_j^2(t)r_j^2+\frac{g}{\prod\lambda}|\psi_0|^2 \tag{4.23}$$

L'equazione di Gross-Pitaevskii può essere quindi riscritta così (semplificando un fattore comune $\exp\{i(s-\beta)\}/\sqrt{\prod\lambda}$)

$$\begin{aligned}
i\hbar\partial_t\psi_0 &= i\hbar\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j^2}r_j\tilde{\nabla}_j\psi_0 \\
&+i\frac{\hbar}{2}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j\prod_{k\neq j}\lambda_k}{\prod\lambda}\psi_0+\frac{m}{2}\sum_j\left(\frac{\ddot{\lambda}_j}{\lambda_j}-\frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2}\right)r_j^2\psi_0-\hbar\dot{\beta}\psi_0 \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_j\frac{1}{\lambda_j^2}\tilde{\nabla}_j^2\psi_0-i\hbar\sum_j\frac{1}{\lambda_j}\left(\tilde{\nabla}_j\psi_0\right)\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j}r_j-i\frac{\hbar}{2}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j}{\lambda_j}\psi_0+\frac{m}{2}\sum_j\frac{\dot{\lambda}_j^2}{\lambda_j^2}r_j^2\psi_0 \\
&+\frac{1}{2}m\sum_j\omega_j^2(t)r_j^2\psi_0+\frac{g}{\prod\lambda}|\psi_0|^2\psi_0 \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_j\frac{1}{\lambda_j^2}\tilde{\nabla}_j\psi_0+\frac{1}{2}m\sum_j\left(\omega_j^2(t)+\frac{\ddot{\lambda}_j}{\lambda_j}\right)r_j^2\psi_0+\frac{g}{\prod\lambda}|\psi_0|^2\psi_0-\hbar\dot{\beta}\psi_0
\end{aligned}$$

Osserviamo che fino a questo punto abbiamo sfruttato solo la forma del potenziale in eq. (4.1) ma non abbiamo detto niente sulla condizione iniziale ψ_0 . Utilizzando l'ultima equazione è possibile ricavare i comportamenti di scaling sia nel caso non-interagente che nel limite Thomas-Fermi.

4.2.1 Scaling Thomas-Fermi

Utilizzando l'equazione di scaling (4.13) già trovata in precedenza, e ponendo

$$\hbar\dot{\beta} = \frac{\mu}{\prod_j \lambda_j} \quad (4.24)$$

si ha

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{1}{\lambda_j^2} \tilde{\nabla}_j \psi_0 + \frac{1}{2}m \sum_j \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^2 \prod \lambda} r_j^2 \psi_0 + \frac{g}{\prod \lambda} |\psi_0|^2 \psi_0 - \frac{\mu}{\prod \lambda} \psi_0 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{1}{\lambda_j^2} \tilde{\nabla}_j \psi_0 + \frac{1}{\prod \lambda} \left[\frac{1}{2}m \sum_j \omega_j^2(0) \tilde{r}_j^2 + g|\psi_0|^2 - \mu \right] \psi_0 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{1}{\lambda_j^2} \tilde{\nabla}_j \psi_0 + \frac{1}{\prod \lambda} \left[V(\vec{r}, 0) + g|\psi_0|^2 - \mu \right] \psi_0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

per cui, se siamo nel limite Thomas-Fermi ed il condensato si trova inizialmente nel ground-state (4.2), il termine di derivata spaziale è trascurabile, e il termine tra parentesi quadra si annulla per la (4.2). Questo implica $i\hbar\partial_t\psi_0 = 0$, ovvero che non c'è una dipendenza esplicita dal tempo, che è tutta contenuta nei parametri di scaling. Se invece siamo prossimi ma non esattamente nel limite TF, l'equazione (4.25) è comunque utile per risolvere la dinamica residua che non è già contenuta nello scaling¹.

4.2.2 Scaling non-interagente

Per procedere in modo analogo al caso precedente, dobbiamo individuare un'equazione per i parametri di scaling $\lambda_i(t)$ che ci permetta di far comparire l'equazione stazionaria per il caso non-interagente; poniamo quindi

$$\hbar\dot{\beta} = \sum_j \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega_j(0)}{\lambda_j^2} \quad (4.26)$$

e

$$\ddot{\lambda}_j(t) = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^3} - \omega_j^2(t)\lambda_j \quad (4.27)$$

da cui si ha ($g = 0$)

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \frac{1}{\lambda_j^2} \tilde{\nabla}_j \psi_0 + \frac{1}{2}m \sum_j \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^4} r_j^2 \psi_0 - \sum_j \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega_j(0)}{\lambda_j^2} \psi_0 \\ &= \sum_j \frac{1}{\lambda_j^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\nabla}_j + V(\vec{r}, 0) - \frac{1}{2} \hbar\omega_j(0) \right] \psi_0 \end{aligned} \quad (4.28)$$

¹Nel caso dell'espansione libera, che tratteremo in seguito, questo permette di ridurre notevolmente le difficoltà numeriche in quanto l'aumento delle dimensioni del sistema - e quindi della griglia di calcolo - è compensato dai parametri di scaling.

anche questa volta, se il sistema si trova inizialmente nel ground-state (non-interagente), il termine tra parentesi quadre è nullo e tutta la dipendenza dal tempo è quindi contenuta nelle equazioni di scaling (4.27). Osserviamo che, a differenza del caso Thomas-Fermi, nel caso non interagente le equazioni per i parametri di scaling λ_j sono disaccoppiate (non compare il termine di produttoria al denominatore).

4.3 Soluzione delle equazioni di scaling

Abbiamo visto come dall'equazione di Gross-Pitaevskii possiamo ricavare due diverse equazioni di scaling per l'evoluzione dei parametri $\lambda_j(t)$ nel caso del limite di Thomas-Fermi e nel caso non interagente

$$\begin{cases} \ddot{\lambda}_j(t) = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j \prod_i \lambda_i} - \omega_j^2(t)\lambda_j & \text{limite Thomas-Fermi} \\ \ddot{\lambda}_j(t) = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^3} - \omega_j^2(t)\lambda_j & \text{limite non interagente} \end{cases}$$

4.3.1 Espansione libera

Come primo esempio dell'utilizzo delle equazioni di scaling consideriamo l'espansione libera di un condensato inizialmente confinato da un potenziale armonico. Supporremo quindi che all'istante $t = 0$ le frequenze di trappola siano poste a zero

$$\omega_i(t) = \begin{cases} \omega_i(0) \neq 0 & t \leq 0 \\ 0 & t > 0. \end{cases}$$

Supporremo inoltre che il condensato si trovi nel ground-state, con condizioni iniziali che quindi sono $\lambda_j(0) = 1$ e $\dot{\lambda}_j(0) = 0$.

Caso non interagente. Con queste ipotesi l'evoluzione dei parametri di scaling è data dall'equazione

$$\ddot{\lambda}_j(t) = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^3} \tag{4.29}$$

la cui soluzione è

$$\lambda_j(t) = \sqrt{1 + \omega_j^2(0)t^2} \tag{4.30}$$

come si può facilmente verificare.

Dimostrazione.

$$\dot{\lambda}_j(t) = \frac{1}{2} \frac{2\omega_j^2(0)t}{\sqrt{1 + \omega_j^2(0)t^2}} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} \ddot{\lambda}_j(t) &= \frac{\omega_j^2(0)}{\sqrt{1 + \omega_j^2(0)t^2}} - \frac{1}{2} \frac{\omega_j^2(0)t2\omega_j^2(0)t}{\left(\sqrt{1 + \omega_j^2(0)t^2}\right)^3} \\ &= \frac{1}{\lambda_j^3} [\omega_j^2(0) (1 + \omega_j^2(0)t^2) - \omega_j^4(0)t^2] = \frac{\omega_j^2(0)}{\lambda_j^3} \end{aligned} \quad (4.32)$$

□

Questo vuol dire che la larghezza del condensato, che è inizialmente fissata² dalla lunghezza dell'oscillatore in ciascuna direzione $R_j \propto \sqrt{\hbar/m\omega_j}$, evolve nel tempo come

$$\begin{aligned} R_i(t) &= R_i(0) \sqrt{1 + \omega_i^2(0)t^2} \\ &\propto \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_i}} \sqrt{1 + \omega_i^2(0)t^2} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Consideriamo in particolare il caso di un potenziale a simmetria cilindrica

$$V = \frac{1}{2}m\omega_{\perp}^2 r_{\perp}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 ; \quad (4.34)$$

in questo caso si usa definire l'*aspect ratio* come rapporto tra i raggi quadratici medi radiale e assiale

$$\frac{R_{\perp}(t)}{R_z(t)} = \sqrt{\frac{\omega_z}{\omega_{\perp}}} \sqrt{\frac{1 + \omega_{\perp}^2 t^2}{1 + \omega_z^2 t^2}} = \sqrt{\lambda} \sqrt{\frac{1 + \omega_{\perp}^2 t^2}{1 + \omega_z^2 t^2}} \quad (4.35)$$

con $\lambda = \omega_z/\omega_{\perp}$. È facile quindi verificare che mentre l'*aspect ratio* iniziale è $\sqrt{\lambda}$, nel limite $t \rightarrow \infty$ ($t \gg 1/\omega_z, 1/\omega_{\perp}$) si ha

$$\frac{R_{\perp}(t)}{R_z(t)} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\omega_r}{\omega_z}} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \quad (4.36)$$

In sostanza quello che accade è che nel limite di $t \rightarrow \infty$ l'*aspect ratio* diventa l'inverso di quello iniziale (vedi linea tratteggiata in Fig. 4.1).

²Nel caso non interagente la "larghezza" del condensato - che si trova nel ground-state dell'oscillatore armonico - è data dal raggio quadratico medio $R_i = \sqrt{\langle r_i^2 \rangle}$. Poiché l'unica scala di lunghezze è quella fissata dalla lunghezza dell'oscillatore $a_{ho_j} = \sqrt{\hbar/m\omega_j}$, sarà $R_i \propto \sqrt{\hbar/m\omega_j}$, con una costante di proporzionalità che è un semplice fattore numerico.

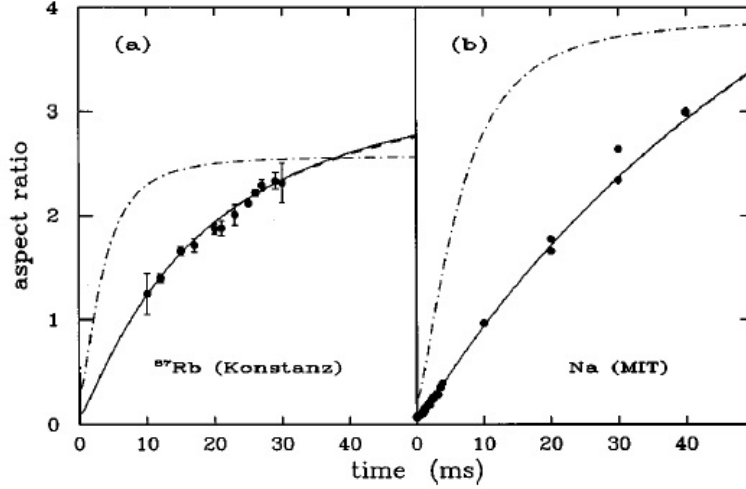


Figura 4.1: Evoluzione dell'*aspect ratio* ottenuta dalla soluzione delle equazioni di scaling per l'espansione libera, nel caso non interagente (linea tratteggiata) e in quello Thomas-fermi (linea continua), per due diverse situazioni sperimentali (rappresentate dai punti, ben descritti dal regime TF). *Figura tratta da [1] (fig. 18).*

Limite Thomas-Fermi. In questo caso la presenza di un termine di accoppiamento tra i diversi parametri di scaling λ_j rende più difficile una risoluzione generale del problema. Considereremo quindi il caso particolare del potenziale a simmetria cilindrica che abbiamo appena visto per il caso non interagente. Con questa ipotesi il sistema in Eq. (4.13) si riduce a due sole equazioni

$$\begin{cases} \ddot{\lambda}_\perp = \frac{\omega_\perp^2(0)}{\lambda_\perp^3 \lambda_z} & (4.37) \\ \ddot{\lambda}_z = \frac{\omega_z^2(0)}{\lambda_z^2 \lambda_\perp^2} & (4.38) \end{cases}$$

Supporremo inoltre di essere in geometria fortemente allungata nella direzione assiale, $\omega_z(0)/\omega_\perp(0) \equiv \epsilon \ll 1$. Passando quindi a variabili adimensionali, ponendo $\tau = \omega_\perp(0)t$, le equazioni precedenti si riscrivono così

$$\begin{cases} \frac{d^2 \lambda_\perp}{d\tau^2} = \frac{1}{\lambda_\perp^3 \lambda_z} & (4.39) \\ \frac{d^2 \lambda_z}{d\tau^2} = \frac{\epsilon^2}{\lambda_z^2 \lambda_\perp^2} & (4.40) \end{cases}$$

con condizioni iniziali analoghe al caso precedente, $\lambda_j(0) = 1$, $\dot{\lambda}_j(0) = 0$.

Cerchiamo ora una soluzione che abbia la forma di uno sviluppo in serie di ϵ

$$\lambda_{\perp}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \lambda_{\perp}^{(n)}(t) \quad (4.41)$$

$$\lambda_z(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n \lambda_z^{(n)}(t) \quad (4.42)$$

Riscriviamo il sistema di equazioni differenziali in forma compatta

$$\begin{cases} \lambda_{\perp}^3 \lambda_z \ddot{\lambda}_{\perp} = 1 \\ \lambda_{\perp}^2 \lambda_z^2 \ddot{\lambda}_z = \epsilon^2 \end{cases}$$

sviluppendolo all'ordine più basso in ϵ . Scriviamo quindi la prima equazione all'ordine zero e la seconda fino al secondo ordine in ϵ

$$\begin{cases} \lambda_{\perp}^{(0)3} \lambda_z^{(0)} \ddot{\lambda}_{\perp}^{(0)} = 1 \\ \left(\lambda_{\perp}^{(0)} + \epsilon \lambda_{\perp}^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_{\perp}^{(2)} \right)^2 \cdot \end{cases} \quad (4.43)$$

$$\begin{cases} \cdot \left(\lambda_z^{(0)} + \epsilon \lambda_z^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_z^{(2)} \right)^2 \left(\ddot{\lambda}_z^{(0)} + \epsilon \ddot{\lambda}_z^{(1)} + \epsilon^2 \ddot{\lambda}_z^{(2)} \right)^2 = \epsilon^2 \end{cases} \quad (4.44)$$

Consideriamo la (4.44); all'ordine zero questa è semplicemente

$$\lambda_{\perp}^{(0)2} \lambda_z^{(0)2} \ddot{\lambda}_z^{(0)} = 0 \quad (4.45)$$

poichè $\lambda_{\perp}^{(0)}$ e $\lambda_z^{(0)}$ sono diverse da zero, deve essere

$$\ddot{\lambda}_z^{(0)} = 0 \quad (4.46)$$

che implica, ricordando le condizioni iniziali, che $\dot{\lambda}_z^{(0)}(t) = cost = \dot{\lambda}_z^{(0)}(0) = 0$. A sua volta questo implica che $\lambda_z^{(0)}(t) = cost = \lambda_z^{(0)}(0) = 1$; inoltre la (4.43) diventa

$$\ddot{\lambda}_{\perp}^{(0)} = \frac{1}{\lambda_{\perp}^{(0)3}} \quad (4.47)$$

che è analoga all'equazione del caso non interagente e quindi ha come soluzione

$$\lambda_{\perp}^{(0)} = \sqrt{1 + \tau^2} = \sqrt{1 + \omega_{\perp}^2(0)t^2} \quad (4.48)$$

Riscriviamo la (4.44) tenendo conto che $\ddot{\lambda}_z^{(0)} \equiv 0$ e $\lambda_z^{(0)} \equiv 1$

$$\left(\lambda_{\perp}^{(0)} + \epsilon \lambda_{\perp}^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_{\perp}^{(2)} \right)^2 \left(1 + \epsilon \lambda_z^{(1)} + \epsilon^2 \lambda_z^{(2)} \right)^2 \left(\epsilon \ddot{\lambda}_z^{(1)} + \epsilon^2 \ddot{\lambda}_z^{(2)} \right)^2 = \epsilon^2 \quad (4.49)$$

e consideriamo il primo ordine in ϵ

$$\lambda_{\perp}^{(0)2} \ddot{\lambda}_z^{(1)} = 0 \quad (4.50)$$

cioè, come per l'equazione all'ordine zero

$$\ddot{\lambda}_z^{(1)} = 0 \quad (4.51)$$

da cui $\dot{\lambda}_z^{(1)}(t) = \text{cost} = \dot{\lambda}_z^{(1)}(0) = 0$; di conseguenza anche il termine di ordine ϵ di λ_z è nullo.

Consideriamo infine il termine di ordine ϵ^2 della (4.44). Dato che anche $\ddot{\lambda}_z^{(1)} = 0$, questa diventa

$$\lambda_{\perp}^{(0)2} \epsilon^2 \ddot{\lambda}_z^{(2)} = \epsilon^2 \quad (4.52)$$

da cui

$$\ddot{\lambda}_z^{(2)} = \frac{1}{\lambda_{\perp}^{(0)2}} = \frac{1}{1 + \tau^2} \quad (4.53)$$

la cui soluzione è

$$\lambda_z^{(2)}(\tau) = \tau \arctan \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2} \quad (4.54)$$

come è facile verificare.

Dimostrazione.

$$\frac{d\lambda_z}{d\tau} = \arctan \tau + \frac{\tau}{1 + \tau^2} - \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}} 2\tau = \arctan \tau \quad (4.55)$$

$$\frac{d^2\lambda_z}{d\tau^2} = \frac{1}{1 + \tau^2} \quad (4.56)$$

□

In definitiva quindi la soluzione delle equazioni di scaling è data da

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{\perp}(\tau) = \sqrt{1 + \tau^2} \end{array} \right. \quad (4.57)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_z(\tau) = 1 + \epsilon^2 \left(\tau \arctan \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2} \right) \end{array} \right. \quad (4.58)$$

in cui $\tau = \omega_{\perp}(0)t$.

Ricordiamo che nel limite di Thomas-Fermi il condensato ha un profilo di densità parabolico caratterizzato da un raggio di Thomas-Fermi R_j , che evolverà quindi nel seguente modo

$$R_{\perp}(\tau) = R_{\perp}(0)\lambda_{\perp}(\tau) \quad (4.59)$$

$$R_z(\tau) = R_z(0)\lambda_z(\tau) \quad (4.60)$$

con $R_j(0) = \sqrt{2\mu/m\omega_j^2}$. Per quanto riguarda l'aspect ratio abbiamo dunque

$$\begin{aligned} \frac{R_{\perp}(\tau)}{R_z(\tau)} &= \left(\frac{\omega_z}{\omega_{\perp}} \right) \frac{\sqrt{1 + \tau^2}}{1 + \epsilon^2 \left(\tau \arctan \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2} \right)} = \\ &= \epsilon \frac{\sqrt{1 + \tau^2}}{1 + \epsilon^2 \left(\tau \arctan \tau - \ln \sqrt{1 + \tau^2} \right)} \end{aligned} \quad (4.61)$$

e nel limite di $\tau \rightarrow \infty$ si ottiene semplicemente

$$\frac{R_{\perp}(\tau)}{R_z(\tau)} \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \epsilon \frac{\tau}{\epsilon^2 \tau \frac{\pi}{2}} = \frac{2}{\pi \epsilon} \quad (4.62)$$

Come si vede in Fig. 4.1 questo comportamento è ben diverso da quello del caso non interagente, e ben descrive gli esperimenti.

4.3.2 Piccole oscillazioni

In questo paragrafo considereremo le piccole oscillazioni di un condensato interagente confinato in una trappola armonica a simmetria cilindrica, nel caso in cui venga portato leggermente fuori dalla posizione di equilibrio. Vedremo che il sistema si mette ad oscillare intorno alla posizione di equilibrio con frequenze che sono determinate dalle frequenze della trappola ottica di confinamento. Poiché questo è un moto collettivo di tutti gli atomi del condensato (che si muovono in fase), sono dette *oscillazioni collettive*.

Riprendiamo quindi le equazioni di scaling nel limite di Thomas-Fermi

$$\left\{ \begin{array}{l} \ddot{\lambda}_{\perp} = \frac{\omega_{\perp}^2(0)}{\lambda_{\perp}^3 \lambda_z} - \omega_{\perp}^2(t) \lambda_{\perp} \\ \ddot{\lambda}_z = \frac{\omega_z^2(0)}{\lambda_z^2 \lambda_{\perp}^2} - \omega_z^2(t) \lambda_z \end{array} \right. \quad (4.63)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \ddot{\lambda}_{\perp} = \frac{\omega_{\perp}^2(0)}{\lambda_{\perp}^3 \lambda_z} - \omega_{\perp}^2(t) \lambda_{\perp} \\ \ddot{\lambda}_z = \frac{\omega_z^2(0)}{\lambda_z^2 \lambda_{\perp}^2} - \omega_z^2(t) \lambda_z \end{array} \right. \quad (4.64)$$

dove supporremo che le frequenze di trappola siano costanti nel tempo, $\omega_j(t) = \omega_j(0) \equiv \omega_j$. Analogamente al caso dell'espansione libera visto in precedenza, queste equazioni possono essere riscritte in forma adimensionale definendo $\epsilon = \omega_z/\omega_{\perp}$ e $\tau = \omega_{\perp} t$, da cui si ha

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \lambda_{\perp}}{d\tau^2} = \frac{1}{\lambda_{\perp}^3 \lambda_z} - \lambda_{\perp} \\ \frac{d^2 \lambda_z}{d\tau^2} = \frac{\epsilon^2}{\lambda_z^2 \lambda_{\perp}^2} - \epsilon^2 \lambda_z \end{array} \right. \quad (4.65)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \lambda_{\perp}}{d\tau^2} = \frac{1}{\lambda_{\perp}^3 \lambda_z} - \lambda_{\perp} \\ \frac{d^2 \lambda_z}{d\tau^2} = \frac{\epsilon^2}{\lambda_z^2 \lambda_{\perp}^2} - \epsilon^2 \lambda_z \end{array} \right. \quad (4.66)$$

Nel regime di piccole oscillazioni possiamo scrivere

$$\lambda_j(\tau) = 1 + \delta\lambda_j(\tau) \quad \text{con} \quad \delta\lambda_j \ll 1 \quad (4.67)$$

da cui si ottiene

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \delta\lambda_{\perp}}{d\tau^2} = \frac{1}{(1 + \delta\lambda_{\perp})^3 (1 + \delta\lambda_z)} - (1 + \lambda_{\perp}) \\ \frac{d^2 \delta\lambda_z}{d\tau^2} = \frac{\epsilon^2}{(1 + \delta\lambda_z)^2 (1 + \delta\lambda_{\perp})^2} - \epsilon^2 (1 + \delta\lambda_z). \end{array} \right. \quad (4.68)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \delta\lambda_{\perp}}{d\tau^2} = \frac{1}{(1 + \delta\lambda_{\perp})^3 (1 + \delta\lambda_z)} - (1 + \lambda_{\perp}) \\ \frac{d^2 \delta\lambda_z}{d\tau^2} = \frac{\epsilon^2}{(1 + \delta\lambda_z)^2 (1 + \delta\lambda_{\perp})^2} - \epsilon^2 (1 + \delta\lambda_z). \end{array} \right. \quad (4.69)$$

Limitandoci al primo ordine in $\delta\lambda$ il precedente sistema di equazioni diventa

$$\begin{cases} \frac{d^2\delta\lambda_\perp}{d\tau^2} \simeq -4\delta\lambda_\perp - \delta\lambda_z & (4.70) \\ \frac{d^2\delta\lambda_z}{d\tau^2} \simeq -\epsilon^2(2\delta\lambda_\perp + 3\delta\lambda_z) & (4.71) \end{cases}$$

e può essere riscritto in forma matriciale ponendo

$$\delta\lambda = \begin{pmatrix} \delta\lambda_\perp \\ \delta\lambda_z \end{pmatrix} \quad (4.72)$$

da cui si ottiene

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\delta\lambda = -M\delta\lambda \quad (4.73)$$

dove M è la seguente matrice 2×2

$$M = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2\epsilon^2 & 3\epsilon^2 \end{pmatrix}. \quad (4.74)$$

L'equazione (4.73) ha soluzioni del tipo

$$\delta\lambda = \delta\lambda_0 e^{-i\omega\tau} \quad (4.75)$$

con ω che è soluzione dell'equazione agli autovalori

$$\det(M - \omega^2 I) = 0 \quad (4.76)$$

ovverosia

$$\det \begin{pmatrix} 4 - \omega^2 & 1 \\ 2\epsilon^2 & 3\epsilon^2 - \omega^2 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.77)$$

da cui si ottiene

$$\omega^2 = \frac{4 + 3\epsilon^2 \pm \sqrt{9\epsilon^4 - 16\epsilon^2 + 16}}{2}. \quad (4.78)$$

All'ordine più basso in ϵ , le due soluzioni (corrispondenti al \pm) sono

$$\omega_+^2 = \frac{4 + 4}{2} = 4 \quad (4.79)$$

e

$$\omega_-^2 = \frac{4 + 3\epsilon^2 - 4\sqrt{1 - \epsilon^2}}{2} = \frac{3\epsilon^2 + 2\epsilon^2}{2} = \frac{5}{2}\epsilon^2. \quad (4.80)$$

A questo punto possiamo far ricomparire esplicitamente la scala di frequenze ω_\perp , da cui si ha che le frequenze dei due modi di oscillazione sono

$$\omega_+ = 2\omega_\perp \quad (4.81)$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{5}{2}} \frac{\omega_z}{\omega_\perp} \omega_\perp = \sqrt{\frac{5}{2}} \omega_z \quad (4.82)$$

Calcolando anche le ampiezze dei due modi, troveremo che il primo modo - di frequenza $2\omega_{\perp}$ - è un'oscillazione che avviene principalmente lungo la direzione radiale (detto *transverse breathing*), mentre il secondo - di frequenza $(5/2)\omega_z$ - avviene principalmente lungo la direzioni assiale (detto *quadrupolo*). Approfondiremo meglio l'analisi dei moti collettivi nel prossimo capitolo.

Per concludere ricordiamo che questi risultati appena discussi sono stati ottenuti con uno sviluppo al primo ordine in $\delta\lambda$. Come abbiamo visto in questa approssimazione le equazioni sono lineari e i due modi risultano disaccoppiati; considerando invece anche gli ordini successivi la situazione si complica perchè si esce dal regime lineare e compaiono anche termini di accoppiamento tra modi assiali e radiali.

4.4 Scaling di un gas termico non interagente

Comportamenti di scaling possono essere ottenuti anche in presenza di un gas termico³ non interagente in un potenziale armonico dipendente dal tempo [3]. In questo caso occorre prendere in considerazione l'equazione di Heisenberg

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi} = [\hat{\psi}, \hat{H}] = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \frac{1}{2}m\omega_i^2(t)r_i^2 \right] \hat{\psi} \quad (4.83)$$

e, come nel caso dell'equazione di Gross-Pitaevskii, possiamo supporre uno scaling dell'operatore di campo del tipo

$$\hat{\psi}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\prod_j \lambda_j(t)}} \hat{\Phi} \left(\frac{r_i}{\lambda_i(t)}, t \right) e^{i\frac{m}{2\hbar} \sum_j \frac{\dot{\lambda}_j(t)}{\lambda_j(t)} r_j^2} \quad (4.84)$$

con la differenza che non abbiamo incluso esplicitamente il fattore di fase $\beta(t)$. Richiedendo quindi che valgano le usuali equazioni di scaling per i parametri λ_i per il caso non interagente

$$\ddot{\lambda}_i(t) = \frac{\omega_i^2(0)}{\lambda_i^3} - \omega_i^2(t)\lambda_i \quad (4.85)$$

si ha ($\tilde{x}_i = r_i/\lambda_i$)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Phi} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\tilde{x}_i}^2 + \frac{1}{2}m\omega_i^2(0)\tilde{x}_i^2 \right] \hat{\Phi}. \quad (4.86)$$

³Cioè non a $T = 0$ come abbiamo considerato formalmente fino ad ora per un condensato. La trattazione vale sia per bosoni che per fermioni.

Dal momento che il problema è separabile, possiamo fattorizzare l'operatore di campo come

$$\hat{\Phi} = \prod_j \hat{\phi}(\tilde{x}_j, t) \quad (4.87)$$

e definire inoltre una nuova variabile temporale τ per ciascuna direzione spaziale tramite la relazione

$$\tau = \int_0^t dt' \frac{1}{\lambda_i^2(t')} \quad (4.88)$$

per cui l'equazione di evoluzione dell'operatore di campo (4.86) può essere scomposta nelle tre componenti

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\phi}(\tilde{x}_i, \tau) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\tilde{x}_i}^2 + \frac{1}{2} m \omega_i^2(0) \tilde{x}_i^2 \right] \hat{\phi}(\tilde{x}_i, \tau). \quad (4.89)$$

Quindi, con queste trasformazioni, il problema è stato ridotto al caso banale di evoluzione in un potenziale armonico indipendente dal tempo. Supponendo di partire da una situazione iniziale di equilibrio, per la distribuzione di densità del gas abbiamo

$$n(\vec{r}, t) = \langle \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \rangle = \frac{1}{\prod_j \lambda_j} \langle \hat{\Phi}^\dagger \hat{\Phi} \rangle = \frac{1}{\prod_j \lambda_j} n_0 \left(\frac{r_i}{\lambda_i} \right) \quad (4.90)$$

dove $n_0(\vec{r})$ è la distribuzione all'istante iniziale $t = 0$, che non dipende esplicitamente dal tempo essendo per ipotesi di equilibrio.

4.4.1 Distribuzione di equilibrio

Nell'approssimazione semiclassica, la distribuzione di equilibrio può essere scritta così ($\beta = 1/k_B T$)

$$n_0(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}) - \mu)} \pm 1} \quad (4.91)$$

dove il segno più è per la statistica di Fermi-Dirac mentre il segno meno è per la statistica di Bose-Einstein; l'energia $\varepsilon(\vec{r}, \vec{p})$ è data da

$$\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + V_{ho}(\vec{r}). \quad (4.92)$$

La densità spaziale si ottiene quindi semplicemente integrando sugli impulsi

$$n_0(\vec{r}) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}) - \mu)} \pm 1} \quad (4.93)$$

da cui

$$n_0(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_T^3} g_{\frac{3}{2}}(e^{\beta(\mu - V_{ho}(\vec{r}))}) & \text{per bosoni} \\ \frac{1}{\lambda_T^3} f_{\frac{3}{2}}(e^{\beta(\mu - V_{ho}(\vec{r}))}) & \text{per fermioni} \end{cases} \quad (4.94)$$

$$\quad \quad \quad (4.95)$$

dove λ_T è la lunghezza d'onda termica

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$$

e le funzioni $g_{\frac{3}{2}}$ e $f_{\frac{3}{2}}$ sono definite nel seguente modo

$$g_\alpha(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\alpha} = Li_\alpha(z) \quad (4.96)$$

$$f_\alpha(z) = -Li_\alpha(-z) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int dy \frac{y^{\alpha-1}}{(z^{-1}e^y + 1)}, \quad (4.97)$$

dove $\Gamma(\alpha)$ è la funzione Gamma di Eulero. Notiamo che l'espressione per i bosoni è vale per temperature maggiori della temperatura di condensazione, avendo omesso il termine relativo alle particelle nel condensato.

A questo punto possiamo calcolare la larghezza quadratica media della distribuzione spaziale di densità

$$\begin{aligned} \langle r_i^2 \rangle &= \int d^3r r_i^2 n_0(\vec{r}) = \int d^3r \frac{1}{\lambda_T^3} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int dy \frac{y^{1/2} r_i^2}{(e^{-\beta(\mu - V_{ho}(\vec{r}))} e^y \pm 1)} = \\ &= \frac{1}{\prod_j (\sqrt{m} \omega_j)} \frac{1}{m \omega_i^2} \int d^3\xi \frac{1}{\lambda_T^3} \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int dy \frac{y^{1/2} \xi_i^2}{(e^{-\beta(\mu - \sum_i \frac{1}{2} \xi_i^2)} e^y \pm 1)} \end{aligned} \quad (4.98)$$

dove abbiamo definito $\xi_i = \sqrt{m} \omega_i r_i$. Abbiamo quindi

$$\langle r_i^2 \rangle \propto \frac{1}{\omega_i^2 \prod_j (\omega_j)} \quad (4.99)$$

dove il fattore di proporzionalità è un fattore numerico, identico per ogni direzione i (dipende anche dalla massa). Inoltre la larghezza quadratica media dipende anche inversamente dalla produttoria delle frequenze in tutte le direzioni.

4.4.2 Espansione libera

Consideriamo ora il caso dell'espansione libera. L'evoluzione nel tempo è determinata solo dai parametri di scaling, e come nel caso del condensato abbiamo $r_i(t) = r_i(0) \sqrt{1 + \omega_i^2 t^2}$. Se consideriamo quindi l'evoluzione dell'aspect

ratio si ottiene

$$\frac{\sqrt{\langle r_i^2(t) \rangle}}{\sqrt{\langle r_j^2(t) \rangle}} = \frac{\omega_j}{\omega_i} \frac{\sqrt{1 + \omega_i^2 t^2}}{\sqrt{1 + \omega_j^2 t^2}} \quad (4.100)$$

ed è facile vedere che nel limite di $t \rightarrow \infty$ l'aspect ratio tende a 1. Nel caso di un gas termico quindi la distribuzione diventa asintoticamente isotropa, a differenza di quello che abbiamo visto per un condensato in cui la distribuzione si mantiene anisotropa anche asintoticamente.

Approccio semiclassico

Allo stesso risultato si può giungere anche considerando un'espansione balistica, cioè un'espansione del sistema in assenza di un potenziale di confinamento. In questo caso la densità è data dalla relazione

$$n(\vec{r}, \vec{p}, t) = n_0 \left(\vec{r} - \frac{\vec{p}}{m} t, \vec{p} \right) \quad (4.101)$$

Consideriamo quindi il termine di energia $\varepsilon(\vec{r}, \vec{p})$

$$\varepsilon(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + \sum_i \frac{1}{2} m \omega_i^2 r_i^2 \rightarrow \frac{p^2}{2m} + \sum_i \frac{1}{2} m \omega_i^2 \left(r_i - \frac{p_i}{m} t \right)^2 \quad (4.102)$$

che può essere sviluppato cercando di far comparire p in un unico termine quadratico

$$\begin{aligned} & \frac{p^2}{2m} + \sum_i \frac{1}{2} m \omega_i^2 \left(\vec{r} - \frac{\vec{p}}{m} t \right)^2 = \\ & = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 - \sum_i \omega_i^2 r_i p_i t + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 \frac{p_i^2 t^2}{m^2} = \\ & = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 (1 + \omega_i^2 t^2) - \sum_i \omega_i^2 r_i p_i t + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 = \\ & = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 \lambda_i^2 - \frac{2m}{2m} \sum_i \frac{\omega_i^2 r_i p_i t}{\lambda_i} \lambda_i + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 = \\ & = \frac{1}{2m} \sum_i \left(p_i \lambda_i - \frac{m \omega_i^2 r_i t}{\lambda_i} \right)^2 - \frac{1}{2m} \sum_i \left(\frac{m \omega_i^2 r_i t}{\lambda_i} \right)^2 + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 = \\ & = \frac{1}{2m} \sum_i q_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 \left(1 - \frac{\omega_i^2 t^2}{\lambda_i^2} \right) \equiv \bar{\varepsilon}(\vec{r}, \vec{q}) \end{aligned} \quad (4.103)$$

dove abbiamo definito $\lambda_i(t) = \sqrt{1 + \omega_i^2 t^2}$ e $q_i = p_i \lambda_i - m \omega_i^2 r_i t / \lambda_i$. Semplificando ulteriormente abbiamo

$$\bar{\varepsilon}(\vec{r}, \vec{q}) = \frac{1}{2m} \sum_i q_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 r_i^2 \left(1 - \frac{\omega_i^2 t^2}{\lambda_i^2}\right) \quad (4.104)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2m} \sum_i q_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 \frac{r_i^2}{\lambda_i^2} (\lambda_i^2 - \omega_i^2 t^2) = \\ &= \frac{1}{2m} \sum_i q_i^2 + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 \frac{r_i^2}{\lambda_i^2} \end{aligned} \quad (4.105)$$

Possiamo quindi scrivere

$$n(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} n(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{\prod_i \lambda_i} \int \frac{d^3 q}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{e^{\beta(\bar{\varepsilon}(\vec{r}, \vec{q}) - \mu)} \pm 1} \quad (4.106)$$

da cui è facile ottenere

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{\prod_j \lambda_j} n_0 \left(\frac{r_i}{\lambda_i} \right). \quad (4.107)$$

4.5 Distribuzione dei momenti

In quest'ultima sezione vedremo come è possibile ricavare delle informazioni sulla distribuzione nello spazio dei momenti di un condensato dalla distribuzione spaziale dopo un'espansione libera. Nel caso non interagente⁴, l'evoluzione libera della funzione d'onda $\psi(\vec{r}, t)$ del condensato è descritta dalla seguente equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi \quad (4.108)$$

la cui soluzione può essere scritta così

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3 p \tilde{\psi}_0(\vec{p}) e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} e^{-i\frac{p^2}{2m} \frac{t}{\hbar}} \quad (4.109)$$

Consideriamo l'esponente e cerchiamo anche in questo caso di far apparire un termine quadratico; abbiamo

$$\begin{aligned} \frac{\vec{p}\cdot\vec{x}}{\hbar} - \frac{p^2}{2m} \frac{t}{\hbar} &= -\frac{t}{2m\hbar} \left(p^2 - \frac{2m}{t} \vec{p}\cdot\vec{x} \right) = \\ &= -\frac{t}{2m\hbar} \left(\vec{p} - \frac{m\vec{x}}{t} \right)^2 + \frac{t}{2m\hbar} \frac{m^2 x^2}{t^2} = \\ &= -\frac{t}{2m\hbar} \left(\vec{p} - \frac{m\vec{x}}{t} \right)^2 + \frac{1}{2} m \frac{x^2}{\hbar t^2} \end{aligned} \quad (4.110)$$

⁴Sperimentalmente è possibile annullare il termine nonlineare nell'equazione di Gross-Pitaevskii - che è dovuto alle interazioni a due corpi - tramite dei campi magnetici, sfruttando le cosiddette risonanze di Feshbach che modificano le proprietà collisionali.

nel limite $t \rightarrow \infty$ il secondo termine diventa trascurabile e possiamo scrivere

$$\psi(\vec{x}, t) \simeq \int d^3p \tilde{\psi}_0(\vec{p}) e^{-i\frac{t}{2m\hbar}(\vec{p} - \frac{m\vec{x}}{t})^2} = \int d^3q \tilde{\psi}_0(\vec{q} + \frac{m\vec{x}}{t}) e^{-i\frac{t}{2m\hbar}q^2} \quad (4.111)$$

inoltre, poiché nel limite $t \rightarrow \infty$ l'esponentiale è un termine rapidamente oscillante, l'unico termine che conta ai fini dell'integrale è quello che annulla l'esponente. Infatti si può dimostrare che vale

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \int dx f(x) e^{-itx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} e^{i\pi/4} f(0) + o(1/t) \quad (4.112)$$

e di conseguenza, nel limite $t \rightarrow \infty$ si ha

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 \simeq \frac{mh}{t} \left| \tilde{\psi}_0\left(\frac{m\vec{x}}{t}\right) \right|^2 \quad (4.113)$$

cioè la distribuzione spaziale nel punto \vec{x} asintoticamente diventa proporzionale alla distribuzione iniziale degli impulsi, con $\vec{p} = m\vec{x}/t$. Questa relazione viene impiegata sperimentalmente - dove il regime asintotico $t \rightarrow \infty$ viene raggiunto dopo qualche decina di millisecondi di espansione balistica - per ricostruire la distribuzione degli impulsi. Osserviamo che per ottenere questo risultato non abbiamo fatto ipotesi sul potenziale iniziale.

Bibliografia

- [1] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).
- [2] Y. Castin and R. Dum, *Bose-Einstein condensates in Time Dependent Traps*, Phys. Rev. Lett. **77**, 5315 (1996).
- [3] G. M. Bruun and C. W. Clark, *Ideal gases in time-dependent traps*, Phys. Rev. A **61**, 061601 (2000).

Capitolo 5

Eccitazioni collettive

In questo capitolo discuteremo l'approssimazione di Bogoliubov per descrivere le eccitazioni di un sistema bosonico, in regime lineare. Questa permette di calcolare lo spettro delle eccitazioni (fluttuazioni termiche e/o quantistiche) oltre l'approssimazione di campo medio della teoria di Gross-Pitaevskii. In un sistema uniforme tali eccitazioni risultano essere fononi (onde con relazione di dispersione lineare), la cui presenza è strettamente collegata alle proprietà superfluide del sistema. Considereremo infine eccitazioni tipo vortici quantizzati (anch'esse manifestazione della superfluidità) per un sistema confinato in potenziali armonici (soluzioni dell'equazione di GP non lineare).

5.1 Eccitazioni di Bogoliubov

Consideriamo un gas di bosoni descritto dall'hamiltoniana

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{g}{2} \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (5.1)$$

dove gli operatori di campo $\hat{\psi}$ e $\hat{\psi}^\dagger$ soddisfano le regole di commutazione

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')] &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')] &= 0 \\ [\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}')] &= 0, \end{aligned}$$

e supponiamo di essere a temperature al di sotto della temperatura critica, dove l'operatore di campo $\hat{\psi}$ può essere separato nella parte relativa al condensato $\varphi(\vec{r})$, e in quella delle fluttuazioni (termiche e/o quantistiche, non condensate) $\hat{\phi}(\vec{r})$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \hat{\phi}(\vec{r}) \quad (5.2)$$

dove le regole di commutazione per $\hat{\phi}(\vec{r})$ sono le stesse del campo $\hat{\psi}(\vec{r})$, e la φ soddisfa l'equazione di Gross-Pitaevskii (3.8). Con questa separazione la *matrice densità* del sistema diventa

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \langle \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') \rangle = \varphi^*(\vec{r}) \varphi(\vec{r}') + \langle \hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\phi}(\vec{r}') \rangle. \quad (5.3)$$

A questo punto è utile passare ad una descrizione tipo Meccanica Statistica, definendo un'hamiltoniana gran canonica

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N} = \hat{H} - \mu \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (5.4)$$

dove il potenziale chimico μ , accoppiato all'operatore numero \hat{N} , ha il ruolo di moltiplicatore di Lagrange associato alla conservazione del numero di particelle (in media).

Utilizzando le (5.1) e (5.2), e tenendo solamente i termini fino al secondo ordine in ϕ , otteniamo la cosiddetta *hamiltoniana di Bogoliubov*

$$\begin{aligned} \hat{K}_B = & \int d\vec{r} \varphi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \mu + \frac{g}{2} |\varphi|^2 \right] \varphi \\ & + \int d\vec{r} \hat{\phi}^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \mu + 2g |\varphi|^2 \right] \hat{\phi} \\ & + \frac{g}{2} \int d\vec{r} \left(\varphi^{*2} \hat{\phi} \hat{\phi} + \hat{\phi}^\dagger \hat{\phi}^\dagger \varphi^2 \right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

dove abbiamo utilizzato anche il fatto che la funzione d'onda del condensato soddisfa l'equazione di Gross-Pitaevskii (3.16). Questo operatore può essere messo in forma diagonale tramite una trasformazione di Bogoliubov, scrivendo il termine di condensato φ come

$$\varphi = \sqrt{n_0} e^{iS} \quad (5.6)$$

ed introducendo la seguente trasformazione per i termini $\hat{\phi}$ e $\hat{\phi}^\dagger$ relativi alle fluttuazioni

$$\hat{\phi}(\vec{r}) = e^{iS} \sum_j \left[u_j(\vec{r}) \hat{\alpha}_j - v_j^*(\vec{r}) \hat{\alpha}_j^\dagger \right] \quad (5.7)$$

$$\hat{\phi}^\dagger(\vec{r}) = e^{-iS} \sum_j \left[u_j^*(\vec{r}) \hat{\alpha}_j^\dagger - v_j(\vec{r}) \hat{\alpha}_j \right] \quad (5.8)$$

dove la somma è estesa solo alla parte non condensata.

Vedremo tra poco che gli operatori $\hat{\alpha}_j$ e $\hat{\alpha}_j^\dagger$ possono essere interpretati come operatori di distruzione e creazioni di quasiparticelle, mentre u_j e v_j sono delle funzioni su campo complesso che rappresentano le relative autofunzioni

delle eccitazioni al sistema. Gli operatori $\hat{\alpha}_j$ e $\hat{\alpha}_j^\dagger$ devono quindi obbedire alle regole di commutazione tipiche di operatori di creazione e distruzione

$$\left[\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_k^\dagger \right] = \delta_{jk} \quad (5.9)$$

$$\left[\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_k \right] = \left[\hat{\alpha}_j^\dagger, \hat{\alpha}_k^\dagger \right] = 0. \quad (5.10)$$

Componendo queste regole di commutazione con le regole di commutazione tra $\hat{\phi}$ e $\hat{\phi}^\dagger$ otteniamo le relazioni di completezza

$$\sum_j \left[u_j(\vec{r}) u_j^*(\vec{r}') - v_j^*(\vec{r}) v_j(\vec{r}') \right] = \delta(\vec{r}, \vec{r}') \quad (5.11)$$

$$\sum_j \left[u_j(\vec{r}) v_j^*(\vec{r}') - v_j^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}') \right] = 0 \quad (5.12)$$

$$\sum_j \left[u_j^*(\vec{r}) v_j(\vec{r}') - v_j(\vec{r}) u_j^*(\vec{r}') \right] = 0 \quad (5.13)$$

Sostituendo la (5.7) e la (5.8) nell'hamiltoniana di Bogoliubov (5.5) si ottiene:

$$\begin{aligned} \hat{K}_B = & \int d\vec{r} \varphi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \mu + \frac{g}{2} |\varphi|^2 \right] \varphi \\ & + \sum_{jk} \int d\vec{r} \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_k^\dagger \left[v_j \mathcal{L} v_k^* - \frac{1}{2} g |\varphi|^2 (u_j v_k^* + u_k^* v_j) \right] \\ & + \sum_{jk} \int d\vec{r} \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_k \left[u_j^* \mathcal{L} u_k - \frac{1}{2} g |\varphi|^2 (v_j^* u_k + v_k u_j^*) \right] \\ & - \sum_{jk} \int d\vec{r} \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_k \left[v_j \mathcal{L} u_k - \frac{1}{2} g |\varphi|^2 (u_j u_k + v_k v_j) \right] \\ & - \sum_{jk} \int d\vec{r} \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_k^\dagger \left[u_j^* \mathcal{L} v_k^* - \frac{1}{2} g |\varphi|^2 (u_j^* u_k^* + v_k^* v_j^*) \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

in cui \mathcal{L} è l'operatore hermitiano

$$\mathcal{L} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\nabla S)^2 - \mu - 2g |\varphi|^2 \quad (5.15)$$

e le funzioni u e v obbediscono alle seguenti equazioni

$$\begin{cases} \mathcal{L} u_j - g |\varphi|^2 v_j = E_j u_j & (5.16) \\ \mathcal{L} v_j - g |\varphi|^2 u_j = -E_j v_j & (5.17) \end{cases}$$

Si ha inoltre che

$$\int d\vec{r} \left[u_j^*(\vec{r}) u_k(\vec{r}) - v_j^*(\vec{r}) v_k(\vec{r}) \right] = \delta_{ij} \quad (5.18)$$

$$\int d\vec{r} \left[u_j(\vec{r}) v_k(\vec{r}) - u_k(\vec{r}) v_j(\vec{r}) \right] = 0 \quad (5.19)$$

Sfruttando le varie proprietà precedenti l'hamiltoniana di Bogoliubov può essere scritta nella forma diagonale

$$\begin{aligned} \hat{K}_B = & \int d\vec{r} \varphi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \mu + \frac{g}{2} |\varphi|^2 \right] \varphi \\ & - \sum_j \int d\vec{r} E_j |v_j(\vec{r})|^2 + \sum_j E_j \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_j \end{aligned} \quad (5.20)$$

dove compare esplicitamente il funzionale energia di Gross-Pitaevskii (nella prima riga) e un termine di hamiltoniana libera (l'ultimo termine) per le quasiparticelle associate agli operatori $\hat{\alpha}_j$, che rappresentano appunto le eccitazioni termiche/quantistiche (rispettivamente a $T \neq 0$ e $T = 0$). Avendo incluso nello sviluppo solo termini fino a quello quadratico, tali eccitazioni risultano non accoppiate tra loro, e si parla quindi di *regime lineare* (non ci sono termini non-lineari che le accoppiano). Il termine $-\sum_j \int d\vec{r} E_j |v_j(\vec{r})|^2$, legato alle fluttuazioni quantistiche, prende invece il nome di *quantum depletion term*, ed è in prima approssimazione trascurabile.

Per descrivere le proprietà termodinamiche del sistema condensato + eccitazioni, possiamo quindi utilizzare l'hamiltoniana (5.20), ricordando che in meccanica statistica il valore di aspettazione di un operatore $\hat{\Omega}$ è dato da

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \frac{Tr \hat{\Omega} e^{-\beta \hat{K}_B}}{Tr e^{-\beta \hat{K}_B}} \quad (5.21)$$

da cui ad esempio si ha

$$\langle \hat{\alpha}_j^\dagger \hat{\alpha}_k \rangle = \langle \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_j^\dagger \rangle - \delta_{jk} = \dots = \delta_{jk} \frac{1}{e^{\beta E_j} - 1} \quad (5.22)$$

ovverosia che le quasiparticelle seguono la statistica di Bose-Einstein.

Abbiamo inoltre

$$n(\vec{r}) = \rho(\vec{r}, \vec{r}) = n_0(\vec{r}) + \sum_j |v_j(\vec{r})|^2 + \sum_j \frac{1}{e^{\beta E_j} - 1} (|u_j(\vec{r})|^2 + |v_j(\vec{r})|^2). \quad (5.23)$$

5.1.1 Eccitazioni di un condensato uniforme

Calcoliamo ora le eccitazioni di Bogoliubov nel caso di un condensato uniforme, in assenza di potenziali esterni, $V(\vec{r}) = 0$. In questo caso la soluzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii è di tipo onda piana

$$\varphi = \sqrt{n_0} e^{i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} = \sqrt{n_0} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (5.24)$$

e il potenziale chimico è dato da

$$\mu = \frac{1}{2} m v^2 + n_0 g \quad (5.25)$$

Supponiamo che anche le eccitazioni collettive u e v siano del tipo onda piana, cioè

$$u_{\vec{k}} \sim A_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (5.26)$$

$$v_{\vec{k}} \sim B_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (5.27)$$

Nel caso omogeneo l'operatore \mathcal{L} è dato da

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{q})^2 + 2gn_0 - \frac{1}{2}mv^2 - gn_0 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + i\vec{q})^2 + gn_0 - \frac{1}{2}mv^2 \end{aligned} \quad (5.28)$$

da cui

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= A_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} + \vec{q})^2 + gn_0 - \frac{1}{2}mv^2 \right] = \\ &= A_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{q}}{m} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} + gn_0 - \frac{1}{2}mv^2 \right] \\ &= A_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left[\varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\vec{k} \cdot \vec{v} + gn_0 \right] \end{aligned} \quad (5.29)$$

dove $\vec{v} \equiv \vec{p}/m$. In modo analogo possiamo calcolare \mathcal{L}^*v , e di conseguenza il sistema di equazioni

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_{\vec{k}} - g|\varphi|^2 v_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \\ \mathcal{L}^*v_{\vec{k}} - g|\varphi|^2 u_{\vec{k}} = -E_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \end{cases}$$

può essere scritto in forma matriciale

$$M \begin{pmatrix} A_{\vec{k}} \\ B_{\vec{k}} \end{pmatrix} = E_{\vec{k}} \begin{pmatrix} A_{\vec{k}} \\ B_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

avendo definito

$$M = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\vec{k} \cdot \vec{v} + gn_0 & -gn_0 \\ gn_0 & -(\varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\vec{k} \cdot \vec{v} + gn_0) \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Gli autovalori si ottengono richiedendo $\det(M - E_{\vec{k}}I) = 0$:

$$\begin{aligned} & -(\varepsilon_{\vec{k}} + \hbar\vec{k} \cdot \vec{v} + gn_0 - E)(\varepsilon_{\vec{k}} - \hbar\vec{k} \cdot \vec{v} + gn_0 + E) + (gn_0)^2 = 0 \\ & (\varepsilon_{\vec{k}} + gn_0 + (\hbar\vec{k} \cdot \vec{v} - E))(\varepsilon_{\vec{k}} + gn_0 - (\hbar\vec{k} \cdot \vec{v} - E)) - (gn_0)^2 = 0 \\ & (\varepsilon_{\vec{k}} + gn_0)^2 - (\hbar\vec{k} \cdot \vec{v} - E)^2 - (gn_0)^2 = 0 \end{aligned} \quad (5.32)$$

da cui si ottiene

$$E_{\vec{k}} = \hbar \vec{k} \cdot \vec{v} \pm \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}^2 + 2\varepsilon_{\vec{k}} g n_0} \quad (5.33)$$

Per un condensato a riposo, $\vec{v} = 0$, si ha semplicemente

$$E_{\vec{k}} = \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)^2 + 2g n_0 \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (5.34)$$

è si distinguono due contributi: il primo termine sotto radice è quello di particella libera, l'altro è legato alle interazioni. In particolare se $|\vec{k}|$ è grande, oppure se abbiamo un sistema non interagente, l'energia è sostanzialmente quella di particella libera; nel limite opposto $|\vec{k}| \rightarrow 0$ invece si ha

$$E_{\vec{k}} \approx \pm \hbar k \sqrt{\frac{g n_0}{m}} = \hbar k c \quad (5.35)$$

dove $c = \sqrt{g n_0 / m}$ è la velocità del suono ($c = \partial E_k / \partial \hbar k$), vedi Fig. 5.1. La relazione di dispersione per il limite $k \rightarrow 0$ è quindi

$$\hbar \omega_k = \hbar k c \quad (5.36)$$

che è una retta che ha come pendenza proprio la velocità del suono. Le eccitazioni di Bogoliubov sono quindi delle onde piane che si propagano nel condensato con frequenza ω_k data dalla precedente relazione di dispersione. Queste sono un'altra forma di *eccitazioni collettive* del condensato, analoghe a quelle viste in regime TF per un condensato in trappola (modi di quadrupolo e transverse breathing, vedi capitolo precedente).

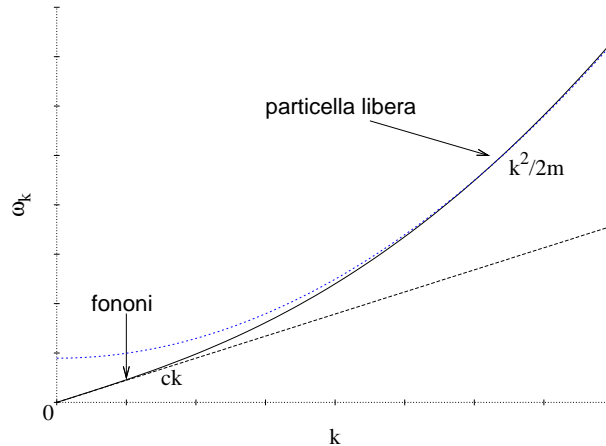


Figura 5.1: Relazione di dispersione di Bogoliubov per un condensato di Bose-Einstein uniforme.

5.1.2 Criterio di Landau per la superfluidità

L'andamento lineare a bassi k della relazione di dispersione delle eccitazioni di un condensato di Bose-Einstein è all'origine delle proprietà superfluide del condensato stesso. Supponiamo infatti di perturbare il condensato tramite un'impurezza di massa M che si muove con velocità \vec{v} . Il sistema risulta superfluido quando l'impurezza non riesce a perturbare il sistema, ovvero non riesce a trasferire energia e creare eccitazioni (un modo alternativo è quello di pensare al condensato che si muove in presenza di un ostacolo senza viscosità).

Le condizioni perché l'oggetto esterno possa trasferire energia ΔE ed impulso $\Delta \vec{P}$, eccitando alcuni modi collettivi, è che siano soddisfatte le relazioni di conservazione dell'energia ΔE

$$\Delta E = \sum_{\vec{k}} \hbar k c n_{\vec{k}} \quad (5.37)$$

e dell'impulso

$$\Delta \vec{P} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} n_{\vec{k}} \quad (5.38)$$

dove $n_{\vec{k}}$ è il numero di modi eccitati con vettore d'onda \vec{k} , in regime fononico.

Osserviamo che

$$c|\Delta \vec{P}| \leq \sum_{\vec{k}} \hbar k c n_{\vec{k}} = \Delta E \quad (5.39)$$

e inoltre

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{|\vec{P}|^2}{2M} - \frac{(\vec{P} - \Delta \vec{P})^2}{2M} = \frac{\vec{P}}{M} \Delta \vec{P} - \frac{|\Delta \vec{P}|^2}{2M} = \\ &= \vec{v} \cdot \Delta \vec{P} - \frac{|\Delta \vec{P}|^2}{2M} \approx \vec{v} \cdot \Delta \vec{P} \leq v |\Delta \vec{P}| \end{aligned} \quad (5.40)$$

cioè

$$c|\Delta \vec{P}| \leq v|\Delta \vec{P}| \quad (5.41)$$

da cui si trova una condizione sulla velocità

$$v \geq c \quad (5.42)$$

Quindi l'oggetto di massa M può perturbare il sistema creando eccitazioni solamente se la sua velocità è maggiore della velocità del suono, che per questo motivo è detta *velocità critica di Landau*.

5.2 Vortici quantizzati

In questa sezione considereremo un altro tipo di eccitazione del condensato, soluzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii (3.16) completa (non in approssimazione lineare), che corrisponde alla presenza di un vortice (quantizzato).

Per fare questo conviene utilizzare la rappresentazione modulo-fase, scrivendo $\psi = \varphi \exp(iS)$, con $\varphi = \sqrt{n_0}$. Alla fase S è associato un campo di velocità \vec{v} , che segue direttamente dall'espressione per la densità di corrente

$$\vec{j} \equiv \frac{i\hbar}{2m} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi] = \frac{\hbar}{m} n_0 \nabla S \rightarrow \vec{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S. \quad (5.43)$$

Consideriamo ora una soluzione a simmetria cilindrica, $n_0 = n_0(r, z)$, con campo di velocità non nullo che ruota intorno all'asse z ($r = 0$). Ricordando che il gradiente in coordinate cilindriche è

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (5.44)$$

e richiedendo che l'unica componente non nulla della velocità sia quella tangenziale, $\vec{v} = (0, v_\phi, 0)$, dalla (5.43) si ha che la fase S può dipendere solo dall'angolo ϕ , cioè $S = S(\phi)$. La simmetria impone inoltre che, fissato r , la velocità sia costante in modulo, da cui

$$v_\phi = \frac{1}{r} \frac{\partial S}{\partial \phi} = \kappa \phi \quad (5.45)$$

con κ costante. In definitiva, il campo di velocità può essere scritto così

$$\vec{v} = \frac{\hbar}{m} \frac{\kappa}{r} \vec{u}_\phi. \quad (5.46)$$

Richiedendo inoltre che la funzione d'onda sia univocamente definita quando effettuiamo un a rotazione di 2π , $\psi(r, \phi, z) = \psi(r, \phi + 2\pi, z)$, deve essere

$$e^{i\kappa\phi} = e^{i\kappa(\phi+2\pi)} \quad (5.47)$$

cioè κ è un numero intero. Esso rappresenta il quanto di circuitazione di \vec{v} lungo un cammino chiuso (quanto di circolazione) in unità h/m , come è facile verificare¹

$$\oint_C \vec{v} \cdot d\vec{\ell} = \frac{\hbar\kappa}{mr} \oint_C \frac{1}{r} \vec{u}_\phi \cdot d\vec{\ell} = \frac{\hbar\kappa}{m} \oint_C \frac{1}{r} r d\phi = \kappa \frac{h}{m}. \quad (5.49)$$

¹Osserviamo che vale $\nabla \wedge \vec{v} = \nabla \wedge \nabla S = 0$, ma essendo il dominio di definizione di S non semplicemente connesso (nell'origine $r = 0$ c'è una singolarità perché la fase non è ben definita), non vale il teorema di Stokes (Σ è una superficie e $\partial\Sigma$ il suo bordo)

$$0 = \int \nabla \wedge \vec{v} \cdot d\vec{\Sigma} \neq \oint_{\partial\Sigma} \vec{v} \cdot d\vec{\ell}. \quad (5.48)$$

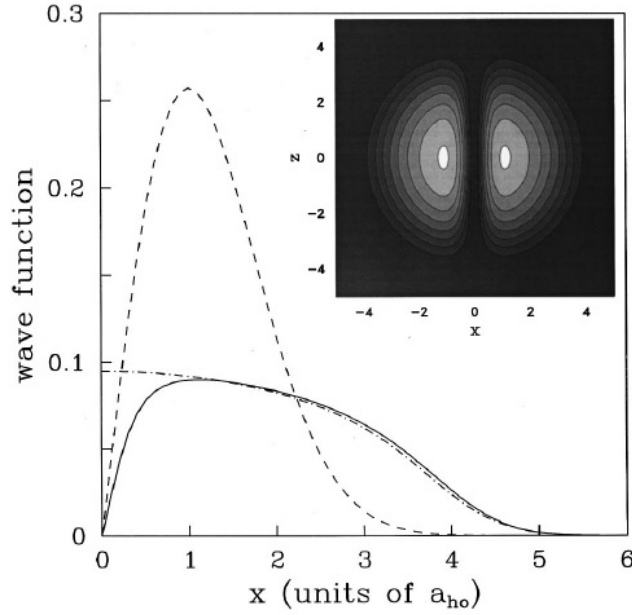


Figura 5.2: Profilo di densità di un vortice nel caso non interagente (linea tratteggiata) e nel limite Thomas-Fermi (linea continua, confrontato con la densità del *groundstate* senza vortice, linea tratto-punto). *Figura tratta da [3] (fig. 31).*

Per determinare la forma della distribuzione di densità, possiamo sostituire l'espressione $\psi = \varphi(r, z)e^{i\kappa\phi}$ nell'equazione di Gross-Pitaevskii stazionaria

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{ho}(r, z) + g|\psi|^2\right)\psi = \mu\psi$$

e ricavare l'equazione corrispondente per $\varphi(r, z)$. Abbiamo

$$\begin{aligned}\nabla^2\psi &= \nabla [(\nabla\varphi)e^{iS} + i(\nabla S)\varphi e^{iS}] = \\ &= (\nabla^2\varphi)e^{iS} + 2i(\nabla S)(\nabla\varphi)e^{iS} + i(\nabla^2 S)\varphi e^{iS} - (\nabla S)^2\varphi e^{iS}\end{aligned}\quad (5.50)$$

e inoltre

$$\nabla S(\phi) = \left(0, \frac{1}{r} \frac{\partial S}{\partial \phi}, 0\right) = \left(0, \frac{\kappa}{r}, 0\right)\quad (5.51)$$

$$\nabla\varphi(r, z) = \left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}, 0, \frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)\quad (5.52)$$

da cui

$$(\nabla S) \cdot (\nabla\varphi) = 0;\quad (5.53)$$

tenendo infine conto che $\nabla^2 S = \nabla_\phi^2 S = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} S = 0$ si ottiene

$$\nabla^2 \psi = e^{iS} \left(\nabla^2 - \frac{\kappa^2}{r^2} \right) \varphi \quad (5.54)$$

e l'equazione di Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo diventa²

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2mr^2} + \frac{1}{2} m (\omega_\perp^2 r^2 + \omega_z^2 z^2) + g\varphi^2 \right] \varphi = \mu\varphi \quad (5.55)$$

risolvendo questa equazione è possibile ricavare la forma della distribuzione di densità del condensato. Come si può osservare in Fig. 5.2, questa si annulla per $r = 0$, in corrispondenza del centro del vortice; si può dimostrare inoltre che il *core* del vortice ha una larghezza r_c dell'ordine della *healing length* ξ , fissata dal bilancio tra energia cinetica e energia di interazione [3].

Nel caso semplice di un condensato non interagente, l'equazione può essere risolta esattamente e si ottiene

$$\varphi \sim r \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} (\omega_\perp r^2 + \omega_z z^2) \right] \quad (5.56)$$

che è un profilo di tipo gaussiano (linea tratteggiata in Fig. 5.2). In questo caso il vortice corrisponde ad uno stato di singola particella con momento angolare κ .

Bibliografia

- [1] A. L. Fetter, *Nonuniform States of an Imperfect Bose Gas*, Ann. Phys. **70**, 67 (1972)
- [2] Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, second edition, Wiley (1987), pag. 316.
- [3] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).

²L'espressione del laplaciano in coordinate cilindriche è

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Capitolo 6

Condensati in reticoli ottici

In questo capitolo discuteremo due diversi approcci per descrivere il comportamento di bosoni in reticoli ottici. Nella prima parte ricaveremo il modello di Bose-Hubbard, ottenuto sviluppando l'operatore di campo in termini di operatori di creazione e distruzione di singole particelle in ciascun sito del reticolo, nel cosiddetto regime *tight-binding* (reticolo intenso). Questo tipo di approccio permette di descrivere la transizione di fase quantistica da superfluido a isolante di Mott. Nella seconda parte invece studieremo la stabilità di un condensato che si muove in un reticolo ottico unidimensionale, utilizzando l'approccio Gross-Pitaevskii. Vedremo che la concomitanza di periodicità (dovuta al reticolo) e nonlinearietà (dovuta alle interazioni) fa nascere due tipi di instabilità (energetica e dinamica) che portano ad una rottura della superfluidità.

6.1 L'hamiltoniana di Bose-Hubbard

Per introdurre il modello di Bose-Hubbard partiamo considerando l'hamiltoniana per il campo bosonico $\hat{\psi}(\vec{r})$

$$\hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ho}(\vec{r}) + V_L(\vec{r}) \right] \hat{\psi} + \frac{g}{2} \int d\vec{r} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi} \quad (6.1)$$

dove $V_{ho}(\vec{r})$ è il potenziale armonico di confinamento e $V_L(\vec{r})$ è il potenziale del reticolo ottico¹ della forma

$$V_L(\vec{r}) = \sum_{i=1}^3 V_{0i} \sin^2(kr_i) \quad (6.2)$$

¹Il reticolo ottico viene creato sfruttando l'interazione di dipolo elettrico tra gli atomi ed un fascio laser retroriflesso - o due fasci contropropaganti - che dà luogo a campo e.m. stazionario.

dove $k = 2\pi/\lambda$ è il vettore d'onda del laser che crea il reticolo (per semplicità assumiamo che k sia lo stesso in tutte le direzioni spaziali), e V_{0i} l'intensità in ciascuna direzione. Il potenziale è quindi periodico, con periodo $d = \lambda/2$. È utile inoltre esprimere le energie in termini dell'energia di rinculo (*recoil energy*) di un atomo che assorbe un fotone del reticolo

$$E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (6.3)$$

definendo l'intensità adimensionale s_i del reticolo nella direzione i -esima come

$$s_i = \frac{V_{0i}}{E_R}. \quad (6.4)$$

Osserviamo anche che si può parlare di regime *tight-binding* già a partire da $s \geq 3$.

Consideriamo ora l'operatore di campo $\hat{\psi}$. Questo può essere scomposto sulla base di *funzioni di Wannier massimamente localizzate* in ciascun sito del reticolo, nel seguente modo

$$\hat{\psi}(\vec{r}) \equiv \sum_{jn} \hat{a}_{jn} w_n(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (6.5)$$

dove la somma è estesa a tutti i siti del reticolo (a cui si riferisce l'indice j) e a tutte le bande di energia (indice n), e funzioni $w(\vec{r} - \vec{r}_j)$ sono funzione di Wannier localizzate nell'intorno del sito j -esimo, e gli operatori \hat{a}_{jn} sono i coefficienti della scomposizione quantizzati come operatori di distruzione, definiti tramite le regole di commutazioni canoniche

$$[\hat{a}_{jn}, \hat{a}_{j'n'}^\dagger] = \delta_{jj'} \delta_{nn'}. \quad (6.6)$$

Ricordiamo che le funzioni di Wannier sono una base per lo spazio di Hilbert di singola particella, e sono definite in termini delle funzioni di Bloch

$$\psi_{n\vec{q}}(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{q}}(\vec{r}) \quad (6.7)$$

(soluzioni dell'equazione di Schrödinger di singola particella con potenziale periodico; \vec{q} è il quasimpulso e $u_{n\vec{q}}(\vec{r})$ una funzione con la stessa periodicità del potenziale) tramite la relazione

$$w_n(\vec{r}) = \left(\sqrt{\frac{d}{2\pi}} \right)^3 \int_B d^3q e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} u_{n\vec{q}}(\vec{r}) \quad (6.8)$$

dove l'integrazione è estesa alla prima zona di Brillouin. Osserviamo che le funzioni di Bloch sono estese su tutto il sistema (sono onde piane con una modulazione dovuta al reticolo), e definite a meno di una fase. Le proprietà

delle funzioni di Wannier dipenderanno quindi dalla scelta delle fasi delle funzioni di Bloch; in particolare si può dimostrare che esiste una opportuna scelta di fase a cui corrispondono funzioni di Wannier fortemente localizzate nell'intorno di ciascun sito reticolo (non è vero per una scelta generica delle fasi). In tal caso si dicono appunto funzioni di Wannier massimamente localizzate, ed è a questa specifica classe di funzioni che faremo riferimento in questo capitolo. In particolare, la (6.8) risulta localizzata nell'origine ($j = 0$) mentre le altre si ottengono per una traslazione pari a \vec{r}_j . Possiamo quindi scrivere $w_{nj}(\vec{r}) = w_n(\vec{r} - \vec{r}_j)$.

Le funzioni di Wannier costituiscono una base ortonormale

$$\int d\vec{r} w_{nj}^*(\vec{r}) w_{n'j'}(\vec{r}) = \delta_{nn'} \delta_{jj'} \quad (6.9)$$

e questa proprietà è fondamentale per lo sviluppo dell'operatore di campo secondo la (6.5).

Per ricavare il modello di Bose-Hubbard faremo una serie di approssimazioni. La prima è quella di limitare la descrizione ad una sola banda di Bloch, quella fondamentale (*single band approximation*), fissando $n = 1$ (ometteremo quindi l'indice n nel seguito). Utilizzando la (6.5), l'hamiltoniana (6.1) può essere riscritta nel seguente modo

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{r} \sum_j \hat{a}_j^\dagger w_j^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ho}(\vec{r}) + V_L(\vec{r}) \right] \sum_{j'} \hat{a}_{j'} w_{j'}(\vec{r}) \\ & + \frac{g}{2} \sum_{jj'lw} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{a}_{j'} \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) w_l^*(\vec{r}) w_{l'}(\vec{r}) w_{j'}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (6.10)$$

Possiamo definire

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_{ho} + \hat{H}_{int} \quad (6.11)$$

con

$$\hat{H}_L = \sum_{jj'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_L(\vec{r}) \right] w_{j'}(\vec{r}) \quad (6.12)$$

$$\hat{H}_{ho} = \sum_{jj'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) V_{ho}(\vec{r}) w_{j'}(\vec{r}) \quad (6.13)$$

$$\hat{H}_{int} = \frac{g}{2} \sum_{jj'lw} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{a}_{j'} \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) w_l^*(\vec{r}) w_{l'}(\vec{r}) w_{j'}(\vec{r}) \quad (6.14)$$

A questo punto facciamo altre approssimazioni per semplificare questi termini. Per quanto riguarda il termine \hat{H}_{ho} , possiamo supporre che il potenziale armonico vari lentamente sulla distanza del sito reticolare, approssimandolo

quindi come costante, pari a $\varepsilon_j \equiv V_{ho}(\vec{r}_j)$ all'interno di ciascun sito

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{ho} &\simeq \sum_{jj'} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} V_{ho}(\vec{r}_j) \int d\vec{r} w^*(\vec{r} - \vec{r}_j) w(\vec{r} - \vec{r}_{j'}) = \\
&= \sum_{jj'} \varepsilon_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \delta_{jj'} = \sum_i \varepsilon_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = \\
&= \sum_j \varepsilon_j \hat{n}_j
\end{aligned} \tag{6.15}$$

dove abbiamo definito l'operatore numero $\hat{n}_j \equiv \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$.

Consideriamo ora il termine di hamiltoniana di Bloch, \hat{H}_L . L'ulteriore approssimazione che faremo adesso è quella di essere nel regime *tight binding*, in cui si ha debole sovrapposizione tra le funzioni di Wannier tra siti oltre i primi vicini, scrivendo

$$\hat{H}_L \simeq \varepsilon_0 \sum_j \hat{n}_j - J \sum_{\langle jj' \rangle} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} \tag{6.16}$$

dove $\langle jj' \rangle$ indica che la somma è estesa solo ai termini primi vicini (specificheremo meglio in seguito come scrivere esplicitamente questo termine in più di una dimensione spaziale), ε_0 è l'energia di singolo sito (costante su tutto il reticolo per l'omogeneità del sistema - qui non è considerato l'effetto del potenziale armonico), definita da

$$\varepsilon_0 = \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_L(\vec{r}) \right] w_j(\vec{r}) \tag{6.17}$$

ed infine J è l'energia di *tunneling* legata all'accoppiamento tra siti primi vicini

$$J = - \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_L(\vec{r}) \right] w_{j'}(\vec{r}) \tag{6.18}$$

Per quanto riguarda invece il termine di interazione \hat{H}_{int} considereremo solo il contributo all'interno del singolo sito del reticolo

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} &\simeq \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j \frac{g}{2} \int d\vec{r} |w_j(\vec{r})|^4 = \\
&= \frac{U}{2} \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j
\end{aligned} \tag{6.19}$$

dove abbiamo definito $U = g \int d\vec{r} |w_j(\vec{r})|^4$. Utilizzando le relazioni di commutazione (6.6), l'hamiltoniana di interazione può essere riscritta come

$$\hat{H}_{int} = \frac{U}{2} \sum_j \hat{a}_j^\dagger (\hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger - 1) \hat{a}_j = \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) \tag{6.20}$$

In definitiva quindi riunendo i vari termini si ottiene l'hamiltoniana di Bose-Hubbard

$$\hat{H}_{HB} = -J \sum_{\langle j,j' \rangle} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} + \sum_j (\varepsilon_0 + \varepsilon_j) \hat{n}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) \quad (6.21)$$

Nel seguito ometteremo il termine ε_0 , che essendo costante non influisce sulle proprietà del sistema.

6.1.1 Approssimazione gaussiana

In generale i parametri J ed U del modello di Bose-Hubbard possono essere espressi in termini dei parametri del reticolo (lunghezza d'onda λ ed intensità V_{0j}) solo tramite un calcolo numerico delle funzioni di Wannier. È però possibile darne una stima approssimata utilizzando un'approssimazione gaussiana per le funzioni di Wannier, come discuteremo qui di seguito.

Passiamo ora al calcolo esplicito dell'energia di interazione. Approssimando la buca di potenziale di un sito con una buca armonica, il potenziale può essere scritto, nel caso unidimensionale, come

$$V_L = V_0 \sin^2(kx) \simeq sE_R(kx)^2 \quad (6.22)$$

e ponendo

$$sE_R(kx)^2 = \frac{1}{2} m \omega_L^2 x^2 \quad (6.23)$$

si ha

$$\omega_L^2 = sE_R \frac{2k^2}{m} = \frac{sE_R}{\hbar^2} 4 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{4E_R^2}{\hbar^2} s \quad (6.24)$$

cioè

$$\omega_L = \frac{2E_R}{\hbar} \sqrt{s} \quad (6.25)$$

In questa ipotesi possiamo approssimare la funzione di Wannier del j -esimo sito con l'autofunzione dello stato fondamentale della singola buca, che corrisponde quindi all'autofunzione dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico di frequenza ω_L (e lunghezza caratteristica $a_L = \sqrt{\hbar/(m\omega_L)}$)

$$w_j(x) = \psi_0(x - x_j) = \left(\frac{k s^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\sqrt{s}}{2} (k(x-x_j))^2}. \quad (6.26)$$

Questo ragionamento può essere esteso facilmente al caso tridimensionale, considerando che l'hamiltoniana è separabile e le autofunzioni sono quindi fattorizzabili

$$w_j(\vec{r}) = \prod_{i=1}^3 \left(\frac{k s_i^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\sqrt{s_i}}{2} (kr_i)^2} \quad (6.27)$$

6.1.2 Calcolo dell'energia di interazione U

Possiamo adesso andare a calcolare l'energia di interazione U . Si ha

$$U = \frac{g}{2} \int d\vec{r} |w(\vec{r})|^4 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \prod_i \int dr_j |w(r_j)|^4 \quad (6.28)$$

e conoscendo la forma della funzione d'onda possiamo scrivere

$$\begin{aligned} \frac{U}{E_R} &= \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \frac{2m}{\hbar^2 k^2} \prod_i \int d(kr_j) \frac{k\sqrt{s_i}}{\pi} e^{-2\sqrt{s_i}(kr_j)^2} = \\ &= \frac{8\pi a}{k^2} \frac{k^3}{\pi^3} \left(\prod_i s_i \right)^{\frac{1}{4}} \prod_i \int d(s_i^{\frac{1}{4}} kr_j) e^{-2(s_i^{\frac{1}{4}} kr_j)^2} = \\ &= \frac{8ka}{\pi^2} \left(\prod_i s_i \right)^{\frac{1}{4}} \prod_i \int d\xi_i e^{-2\xi_i^2} = \\ &= \frac{8ka}{\pi^2} \left(\prod_i s_i \right)^{\frac{1}{4}} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)^3 = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} (ka) \left(\prod_i s_i \right)^{\frac{1}{4}} \end{aligned} \quad (6.29)$$

da cui

$$\frac{U}{E_R} = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} (ka) \left(\prod_i s_i \right)^{\frac{1}{4}} \quad (6.30)$$

Nel caso in cui tutti gli s_i sono uguali si ha²

$$\frac{U}{E_R} = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} (ka) s^{\frac{3}{4}}. \quad (6.31)$$

6.1.3 Calcolo dell'energia di tunneling J

Il calcolo dell'energia di tunneling J richiede un po' di attenzione perchè coinvolge un'integrale di sovrapposizione tra primi vicini, in diverse direzioni spaziali. Andiamo ora a calcolare l'energia di tunneling J . Per prima cosa conviene separare l'hamiltoniana nella somma di tre termini relativi alle tre direzioni

$$H_L \equiv \sum_{i=1}^3 H_i = \sum_{i=1}^3 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + E_R s_i \sin^2(kr_i) \quad (6.32)$$

Procediamo adesso col calcolo dell'energia di tunneling J , definito da

$$J = - \int d\vec{r} w_j^*(\vec{r}) H_L w_{j'}(\vec{r}) \quad (6.33)$$

²Un stima più precisa, ottenuta da un fit numerico, dà $U/E_R = (5.97/2\pi)(ka)s^{0/88}$ [3].

con j e j' primi vicini. Osserviamo che sarebbe più corretto utilizzare invece che un singolo indice j , una terna di indici della forma $\bar{j} = (j_1, j_2, j_3)$. Consideriamo quindi un sito con coordinate $(x_{j_1}, y_{j_2}, z_{j_3})$; i suoi primi vicini sono della forma $(x_{j_1 \pm 1}, y_{j_2}, z_{j_3})$, $(x_{j_1}, y_{j_2 \pm 1}, z_{j_3})$, e $(x_{j_1}, y_{j_2}, z_{j_3 \pm 1})$. In linea di principio quindi abbiamo anche tre termini di tunneling indipendenti, J_1 , J_2 , e J_3 , relativi alle tre direzioni spaziali.

Calcoliamo per esempio il termine J_2 , considerando i siti $(x_{j_1}, y_{j_2}, z_{j_3})$ e $(x_{j_1}, y_{j_2+1}, z_{j_3})$, sfruttando la fattorizzazione delle funzioni di Wannier $w_{\bar{j}}(\vec{r}) = w_{j_1}(x)w_{j_2}(y)w_{j_3}(z)$, che vale indipendentemente dall'approssimazione gaussiana. Abbiamo quindi

$$\begin{aligned} J_2 = & - \int dx w_{j_1}^*(x) H_1 w_{j_1}(x) \int dy w_{j_2}^*(y) w_{j_2+1}(y) \int dz |w_{j_3}(z)|^2 \\ & - \int dx |w_{j_1}(x)|^2 \int dy w_{j_2}^*(y) H_2 w_{j_2+1}(y) \int dz |w_{j_3}(z)|^2 \\ & - \int dx |w_{j_1}(x)|^2 \int dy w_{j_2}^*(y) w_{j_2+1}(y) \int dz w_{j_3}^*(z) H_3 w_{j_3}(z) \end{aligned} \quad (6.34)$$

Questa espressione si semplifica molto considerando le relazioni di ortogonalità delle funzioni di Wannier in (6.9), per cui rimane solo il secondo termine, e si ha semplicemente

$$J_2 = - \int dy w_{j_2}^*(y) H_2 w_{j_2}(y) \quad (6.35)$$

che non dipende esplicitamente da j_2 grazie all'omogeneità spaziale. Il calcolo nelle altre direzioni procede in modo del tutto analogo, e quindi nell'approssimazione gaussiana abbiamo

$$J_i = - \int dr_i w_{j_i}^*(r_i) H_i w_{j_i}(r_i) \quad (6.36)$$

Utilizzando l'approssimazione gaussiana per le funzioni di Wannier si ottiene la seguente espressione per J_i [2]

$$\frac{J_i}{E_R} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} s^{0.75} e^{-2\sqrt{s_i}}. \quad (6.37)$$

Osserviamo però che il termine J dipende significativamente dalla sovrapposizione delle code delle funzioni di Wannier, ed in questo caso l'approssimazione gaussiana è meno buona che per il calcolo delle U , per cui conviene usare la seguente espressione ricavata da un fit numerico [3]

$$\frac{J_i}{E_R} = 1.43s^{0.98} e^{-2.07\sqrt{s_i}}. \quad (6.38)$$

6.1.4 Approssimazione di Gutzwiller e diagramma di fase

Analizziamo adesso le proprietà del ground state dell'hamiltoniana di Bose-Hubbard, che per semplicità riscriviamo qui sotto nel caso unidimensionale

$$\hat{H}_{HB} = -J \sum_{\langle j,j' \rangle} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j'} + \sum_j \varepsilon_j \hat{n}_j + \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) \quad (6.39)$$

Un generico autostato $|\phi\rangle$ di questa hamiltoniana può essere scritto tramite uno sviluppo sulla base di stati di Fock, autostati degli operatori numero \hat{n}_j

$$|\phi\rangle = \sum_{\{n_j\}} c_{\{n_j\}} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (6.40)$$

dove i $c_{\{n_j\}}$ sono i coefficienti dello sviluppo. Tuttavia utilizzare questa base per un calcolo esatto risulta estremamente impraticabile se il numero di siti e di atomi considerati supera le poche unità (il numero di stati cresce fattorialmente, ed i tempi di calcolo diventano estremamente lunghi).

Per ovviare a questo, in letteratura è largamente usata la cosiddetta *approssimazione di Gutzwiller*, che consiste nel fattorizzare gli stati corrispondenti a ciascun sito del reticolo³

$$|\phi\rangle = \prod_j |\phi_j\rangle \quad (6.42)$$

dove gli stati $|\phi_j\rangle$ sono delle combinazioni lineari degli stati numero (Fock) del singolo sito

$$|\phi_j\rangle = \sum_{n_j=0}^{\infty} f_{n_j}^{(j)} |n_j\rangle. \quad (6.43)$$

Lo stato fondamentale del sistema può essere quindi trovato minimizzando l'energia libera

$$F = \langle \psi | H | \psi \rangle - \mu \langle \psi | \sum_i \hat{n}_i | \psi \rangle \quad (6.44)$$

rispetto ai coefficienti $f_{n_j}^{(j)}$ (μ è il potenziale chimico legato alla conservazione del numero di particelle). Senza entrare nei dettagli, quello che si trova nel caso omogeneo (in assenza di potenziale armonico, $\varepsilon_j = 0$) è che il sistema è caratterizzato da una transizione di fase quantistica (dovuta alle fluttuazioni

³Si può dimostrare che che l'approssimazione di Gutzwiller è equivalente alla seguente approssimazione di campo medio del termine di tunneling [4]

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \simeq \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_j \rangle - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle \equiv \varphi_i^* \hat{a}_j + \varphi_j \hat{a}_i^\dagger - \varphi_i^* \varphi_j \quad (6.41)$$

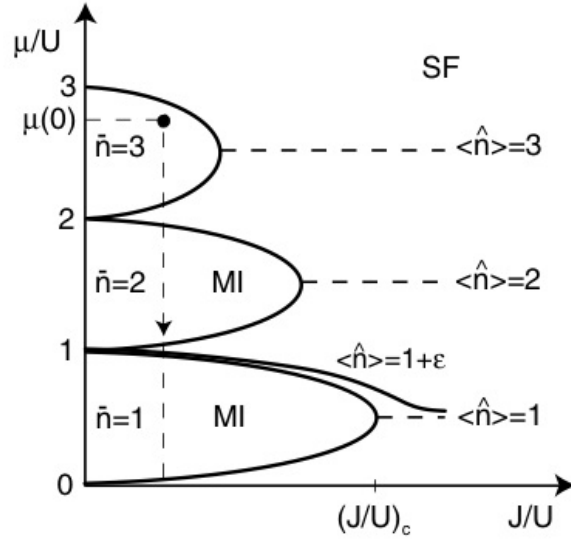


Figura 6.1: Diagramma di fase del modello di Bose-Hubbard per un sistema omogeneo. *Figura tratta da [2].*

quantistiche a $T = 0$) tra una fase superfluida (a bassi U/J) e una di isolante, detta *isolante di Mott*.

La fase superfluida è caratterizzata da

$$\langle \hat{a}_j \rangle = \varphi_j \neq 0 \quad (6.45)$$

dove il campo medio φ_j è la versione discreta della funzione d'onda del condensato nella formulazione Gross-Pitaevskii (più precisamente la sua componente sulla base di Wannier); la densità si ottiene quindi dalla relazione

$$\rho_j = |\varphi_j|^2. \quad (6.46)$$

Nella fase di isolante di Mott, lo stato diventa semplicemente un prodotto di stati numero di singolo sito, cioè $|\phi_j\rangle \rightarrow |n_j\rangle$, che corrisponde ad un numero di occupazione intero

$$\rho_j = \langle \hat{n}_j \rangle = \bar{n} \quad (6.47)$$

e all'annullarsi del campo medio

$$\varphi_i = 0 \quad (6.48)$$

e delle fluttuazioni del numero di particelle in ciascun sito

$$\sigma_i^2 = \frac{\langle \hat{n}_i^2 \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle^2}{\langle \hat{n}_i \rangle} \rightarrow 0. \quad (6.49)$$

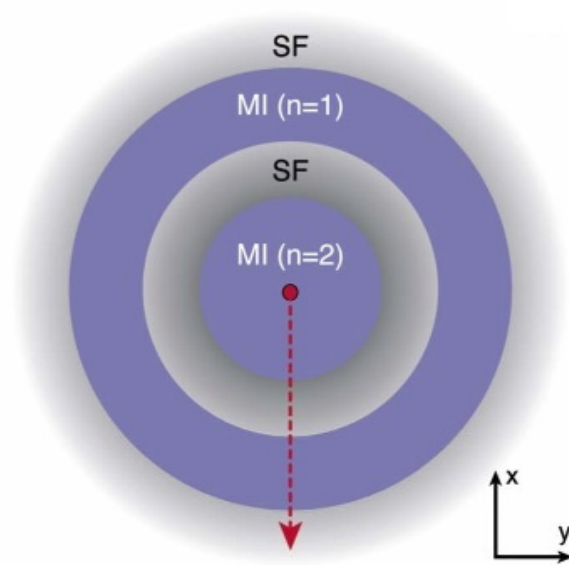


Figura 6.2: Distribuzione spaziale di fasi isolanti di Mott e fasi superfluide in un gas di bosoni confinato in un a trappola armonica. *Figura tratta da [6].*

Il valore critico $(U/J)_c$ a cui avviene la transizione è ben descritto dall'approssimazione di campo-medio (Gutzwiller), per reticoli in due o tre dimensioni spaziali, e vale

$$(U/J)_c = \begin{cases} 5.8z & \bar{n} = 1 \\ 4\bar{n}z & \bar{n} \gg 1 \end{cases}$$

dove z è il numero di primi vicini. Per un sistema unidimensionale invece il campo medio funziona solo qualitativamente, e una stima più precisa dà ($z = 2$)

$$(U/J)_c = \begin{cases} 3.84 & \bar{n} = 1 \\ 2.2\bar{n} & \bar{n} \gg 1. \end{cases}$$

Il diagramma di fase del modello di Bose-Hubbard è riportato in Fig. 6.1.

Osserviamo infine che negli esperimenti con atomi ultrafreddi, la presenza del potenziale di confinamento armonico ($\varepsilon_j \neq 0$) rende il sistema non omogeneo, e nel regime Mott produce una serie di regioni dove si alternano fasi di Mott e fasi superfluide (vedi Fig. 6.2).

6.2 Instabilità energetica e dinamica

Torniamo ora alla descrizione Gross-Pitaevskii di un condensato nel regime superfluido, in presenza di un reticolo non troppo intenso (fino a $s \approx 10$).

In questa sezione vedremo che l'effetto della presenza contemporanea della periodicità dovuta al reticolo e della non linearità dovuta alle interazioni, fa nascere due tipi di instabilità, energetica e dinamica, che portano ad una rottura della superfluidità. Per semplicità considereremo il caso di un sistema unidimensionale, e faremo riferimento alla trattazione in [5].

Iniziamo considerando l'equazione di Gross-Pitaevskii (3.8)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_L(x) + g|\psi|^2 \right] \psi$$

ed introduciamo le seguenti notazioni ($k_L = \pi/\lambda$)

$$V_L(x) = V_0 \cos(2k_L x) \quad (6.50)$$

$$E_L = \frac{4\hbar^2 k_L^2}{m} \quad (6.51)$$

$$\ell = (2k_L)^{-1} \quad (6.52)$$

$$\tau = \left(\frac{E_L}{\hbar} \right)^{-1} \quad (6.53)$$

dove ℓ è una scala di lunghezza e τ una scala temporale. Con queste notazioni, l'equazione di Gross-Pitaevskii diventa ($t \rightarrow t/\tau$, $x \rightarrow x/\ell$)

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + v \cos x + c|\psi|^2 \right] \psi \quad (6.54)$$

con $v = V_0/E_L$ e $c = \pi n_0 a/k_L^2$ e in cui n_0 è la densità media del condensato. Analogamente, il funzionale energia è

$$E[\psi] = \int dx \psi^* \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + v \cos x \right] \psi + \frac{c}{2} \int dx |\psi|^4 \quad (6.55)$$

mentre l'equazione di Gross-Pitaevskii indipendente dal tempo diventa

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + v \cos x + c|\psi|^2 \right] \psi = \mu \psi. \quad (6.56)$$

Questa equazione ammette anche soluzione del tipo di onda di Bloch

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (6.57)$$

in quanto il termine $|\psi(x)|^2 = |u_k(x)|^2$ assume in questo caso la stessa periodicità del reticolo. Un'onda di Bloch corrisponde quindi ad un condensato che si muove nel reticolo con quasimomento k . Vedremo nei prossimi paragrafi che il sistema è superfluido fino ad una certa velocità critica (analoga alla velocità critica di Landau vista nel capito precedente) a cui entrano in gioco

prima effetti dissipativi (instabilità energetica) in presenza di accoppiamento con un sistema esterno (la nube termica per esempio) e poi effetti di instabilità dinamica. In quest'ultimo regime, piccole fluttuazioni iniziali possono crescere esponenzialmente fino a distruggere il condensato (in un esperimento quello che succede è che si ha una perdita di atomi del condensato, che vengono trasferiti alla parte termica incoerente).

6.2.1 Instabilità energetica

Per discutere l'instabilità energetica, consideriamo una soluzione del tipo soluzione stazionaria (onda di Bloch) più fluttuazioni

$$\psi(x) = e^{ikx} [\phi_k(x) + \delta\phi_k(x)] \quad (6.58)$$

analogamente a quanto fatto nel capito precedente, le fluttuazioni possono essere scritte nella forma di Bogoliubov

$$\delta\phi_k(x, q) = u_k(x, q)e^{iqx} + v_k^*(x, q)e^{-iqx} \quad (6.59)$$

dove in questo caso le $u_k(x, q)$ e $v_k(x, q)$ hanno la stessa periodicità del reticolo. Sostituendo questa espressione in quella del funzionale energia (6.55) si ottiene

$$\delta E_k = \int dx \begin{pmatrix} u_k^* & v_k^* \end{pmatrix} M_k(q) \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (6.60)$$

dove $M_k(q)$ è la seguente matrice

$$M_k(q) = \begin{pmatrix} \mathcal{L}(k+q) & c\phi_k^2 \\ c\phi_k^{*2} & \mathcal{L}(-k+q) \end{pmatrix} \quad (6.61)$$

con

$$\mathcal{L}(k) = -\frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} + ik \right)^2 + v \cos x - \mu + 2c|\phi_k|^2. \quad (6.62)$$

Prima di discutere il risultato generale (in cui bisogna ricorrere al calcolo numerico) vediamo cosa succede in un caso particolarmente semplice, nel *limite di reticolo nullo* ($v \rightarrow 0$), dove il problema si risolve analiticamente. In questo caso la funzione d'onda si riduce a un'onda piana

$$\psi \propto e^{ikx} \quad (6.63)$$

e la matrice $M_k(q)$ diventa semplicemente

$$M_k(q) = \begin{pmatrix} q^2/2 + kq + c & c \\ c & q^2/2 - kq + c \end{pmatrix} \quad (6.64)$$

i cui autovalori sono

$$\lambda_{\pm} = \frac{q^2}{2} + c \pm \sqrt{k^2q^2 + c^2}. \quad (6.65)$$

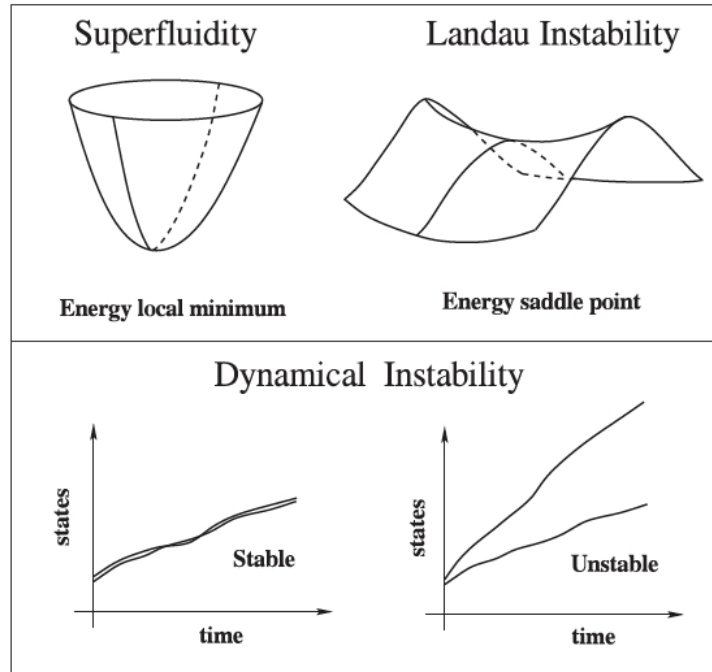


Figura 6.3: Rappresentazione pittorica delle instabilità energetica e dinamica. La prima corrisponde alla situazione in cui lo stato stazionario (superfluido), inizialmente minimo locale dell'energia, diventa un punto sella instabile (fluido normale). L'instabilità dinamica corrisponde invece ad una situazione in cui piccole fluttuazioni iniziali crescono esponenzialmente durante l'evoluzione del sistema, portandolo velocemente lontano dallo stato stazionario. *Figura tratta da [5].*

Quando uno dei due autovalori (λ_-) diventa negativo, questo contribuisce all'energia totale con un termine $\delta E < 0$, e questo significa che eccitare il modo corrispondente abbassa l'energia del sistema. In altre parole, creare eccitazioni diventa energeticamente favorevole, e il sistema è quindi instabile. Nel caso semplice qui considerato, questo avviene per $|k| \geq \sqrt{q^{2/4+c}}$. Il meccanismo è analogo a quello discusso nel capitolo precedente in termini del criterio di Landau per la velocità critica. Da un punto di vista geometrico invece, questo vuol dire che esistono delle direzioni nello spazio delle ψ lungo le quali l'energia decresce, come mostrato in Fig. 6.3. Nel caso del reticolo il concetto si riesprime in termine di quasimomento critico, ma il meccanismo rimane lo stesso (cambia solo il valore critico).

In Fig. 6.4 sono mostrati i regimi di instabilità in funzione del quasimomento k del condensato e q delle eccitazioni, per vari valori del coefficiente del termine non lineare c e diverse intensità del reticolo v .

Osserviamo infine che l'instabilità energetica - essendo legata a processi dissipativi - non può essere messa in evidenza risolvendo l'equazione di

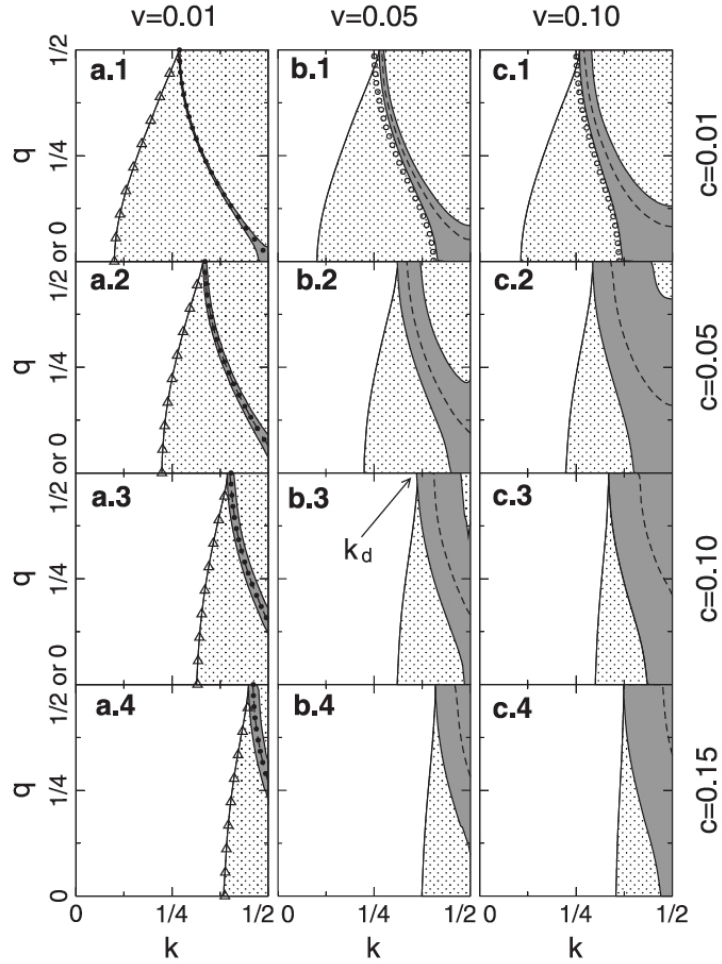


Figura 6.4: Regimi di instabilità energetica (zone punteggiate + grigie) e dinamica (zone grigie) in funzione del quasimomento k del condensato e q delle eccitazioni, per vari valori del coefficiente del termine non lineare c e diverse intensità del reticolo v . *Figura tratta da [5].*

Gross-Pitaevskii, che corrisponde invece ad un'evoluzione unitaria (conserva la norma). In altre parole, la teoria Gross-Pitaevskii prevede l'esistenza di questa instabilità secondo argomenti di tipo energetico, ma per descriverla da un punto di vista dinamico occorre accoppiare la GPE all'equazione che descrive la parte non condensata (termica) o aggiungere un termine dissipativo *ad hoc*.

6.2.2 Instabilità dinamica

Per studiare l'instabilità dinamica procediamo analogamente al caso precedente, considerando però soluzioni che dipendono esplicitamente dal tempo

$$\psi(x) = e^{i(kx - \mu t)} [\phi_k(x) + \delta\phi_k(x, t)] \quad (6.66)$$

con

$$\delta\phi_k(x, t; q) = u_k(x, q)e^{i(qx - \omega_q t)} + v_k^*(x, q)e^{-i(qx - \omega_q t)}. \quad (6.67)$$

Inserendo queste espressioni nell'equazione di Gross-Pitaevskii dipendente dal tempo (6.54) si ottiene la seguente equazione agli autovalori

$$\sigma_z M_k(q) \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \omega_q \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (6.68)$$

dove $M_k(q)$ è la matrice precedente in (6.61) e σ_z è la matrice di Pauli

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.69)$$

Si può mostrare che l'equazione ammette soluzioni nella forma di coppie di autovalori complessi coniugati, $\omega_q = Re(\omega_q) \pm iIm(\omega_q)$. L'instabilità dinamica ha luogo quando alcuni degli autovalori della matrice $\sigma_z M_k(q)$ acquistano una parte immaginaria non nulla, $Im(\omega_q) \neq 0$; in questo caso infatti la dipendenza temporale delle soluzioni (6.67) è del tipo

$$e^{-i\omega_q t} = e^{-iRe(\omega_q)t \pm Im(\omega_q)t} \quad (6.70)$$

per cui ci sono modi (con $Im(\omega_q) > 0$) che crescono esponenzialmente nel tempo. Anche una popolazione infinitesima iniziale può portare ad avere una popolazione macroscopica in tempi rapidi. La struttura della (6.67) comporta inoltre che quando il sistema è instabile dinamicamente, lo sia anche energeticamente, come mostrato in Fig. 6.4. Ricordiamo infine che quanto ricavato in questa sezione vale nel regime lineare (le eccitazioni sono state trattate nell'approccio di bogoliubov, trascurando l'accoppiamento non lineare tra di esse) per cui il presente approccio permette di stabilire quando si attiva l'instabilità, ma cosa succede esattamente quando l'ampiezza delle fluttuazioni cresca a livello macroscopico può essere determinato solo risolvendo l'equazione di Gross-Pitaevskii completa.

Bibliografia

- [1] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett **81**, 3108 (1998).

- [2] W. Zwerger, *MottHubbard transition of cold atoms in optical lattices*, J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt **5** S9 (2003).
- [3] F. Gerbier *et al.*, *Interference pattern and visibility of a Mott insulator*, Phys. Rev. A **72**, 053606 (2005).
- [4] K. Sheshadri *et al.*, *Superfluid and Insulating Phases in an Interacting-Boson Model: Mean-Field Theory and the RPA*, Europhys. Lett. **22**, 257 (1993).
- [5] B. Wu and Q. Niu, *Landau and dynamical instabilities of the superflow of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Phys. Rev. A **64**, 061603(R) (2001); *Superfluidity of Bose-Einstein condensate in an optical lattice: Landau-Zener tunnelling and dynamical instability*, New J. Phys. **5**, 104 (2003).
- [6] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Many-body physics with ultracold gases*, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [7] O. Morsch and M. Oberthaler, *Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices*, Rev. Mod. Phys. **78**, 179 (2006).