**Damian Włodzyński**

# Problem małego polaronu fermionowego w jednowymiarowej pułapce harmonicznej

Rozprawa doktorska

przedstawiona Radzie Naukowej Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk



przygotowana pod kierunkiem

dra hab. Tomasza Sowińskiego, prof. IF PAN

Warszawa 2023

Warszawa, dn. 16.05.2023 r.

Damian Włodzyński
mail: wlodzynski@ifpan.edu.pl
tel: +48 606-368-177
PESEL: 95050809754

**OŚWIADCZENIE**
**autora rozprawy doktorskiej**

Jako autor rozprawy doktorskiej pod tytułem:

*Problem małego polaronu fermionowego w jednowymiarowej pułapce harmonicznej*

przygotowanej pod kierunkiem dra hab. Tomasza Sowińskiego, prof. IFPAN przedłożonej Radzie Naukowej Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk oświadczam, że:

1. rozprawa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób naruszający postanowienia ustawy z dnia 4 lutego 1994 r. o Prawie autorskim i prawach pokrewnych (Dz. U. z 2018 . poz. 1191, z późn. zm.),

2. rozprawa nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem stopnia naukowego w innym postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora,

3. rozprawa doktorska w wersji cyfrowej umieszczona na załączonym nośniku danych jest tożsama z wersją wydrukowaną i przedłożoną w moim postępowaniu w sprawie stopnia doktora,

4. udzielam nieodpłatnie Instytutowi Fizyki Polskiej Akademii Nauk licencji niewyłącznej na umieszczenie pełnego tekstu ww. Rozprawy doktorskiej w wersji elektronicznej na stronie internetowej Instytutu w domenie ifpan.edu.pl i tym samym udostępnienie jej treści dla wszystkich w sieci Internet,

5. oświadczam, że przedmiot rozprawy doktorskiej nie jest objęty tajemnicą prawnie chronioną.



# American Physical Society
# Reuse and Permissions License

27-Apr-2023

This license agreement between the American Physical Society ("APS") and Damian Włodzyński ("You") consists of your license details and the terms and conditions provided by the American Physical Society and SciPris.

## Licensed Content Information

| | |
|---|---|
| **License Number:** | **RNP/23/APR/065744** |
| **License date:** | 27-Apr-2023 |
| **DOI:** | 10.1103/PhysRevA.106.033306 |
| **Title:** | Several fermions strongly interacting with a heavy mobile impurity in a one-dimensional harmonic trap |
| **Author:** | Damian Włodzyński |
| **Publication:** | Physical Review A |
| **Publisher:** | American Physical Society |
| **Cost:** | USD $ 0.00 |

## Request Details

**Does your reuse require significant modifications**: Yes

### Modification Details:

*The figures have been translated from English to Polish. As the sole author of the paper, I permit it.*

| | |
|---|---|
| **Specify intended distribution locations:** | Worldwide |
| **Reuse Category:** | Reuse in a thesis/dissertation |
| **Requestor Type:** | Author of requested content |
| **Items for Reuse:** | Figures/Tables |
| **Number of Figure/Tables:** | 4 |
| **Figure/Tables Details:** | Figure 1b, Figure 2, Figure 3, Figure 4 |
| **Format for Reuse:** | Print and Electronic |
| **Total number of print copies:** | Up to 1000 |

## Information about New Publication:

| | |
|---|---|
| **University/Publisher:** | Institute of Physics, Polish Academy of Sciences |
| **Title of dissertation/thesis:** | Problem małego polaronu fermionowego w jednowymiarowej pułapce harmonicznej |
| **Author(s):** | Damian Włodzyński |
| **Expected completion date:** | May. 2023 |

## License Requestor Information

| | |
|---|---|
| **Name:** | Damian Włodzyński |
| **Affiliation:** | Individual |
| **Email Id:** | wlodzynski@ifpan.edu.pl |

**Streszczenie**

W rozprawie analizuję układ kilku fermionów oddziałujących siłami zerowego zasięgu z pojedynczą niejednorodnością o skończonej masie w jednowymiarowym potencjale harmonicznym. Motywacją do badania tego zagadnienia są współczesne eksperymenty z ultrazimnymi gazami atomowymi, w ramach których badano podobne układy w przypadku równych mas składników mieszaniny. W moich rozważaniach koncentruję się na układach z ciężką niejednorodnością w reżimie silnych oddziaływań odpychających. W ramach analizy wyznaczam energie i profile gęstości dla układu będącego w wielociałowym stanie podstawowym, a także w niskoenergetycznych stanach wzbudzonych. Najważniejszym wynikiem mojej rozprawy jest wyprowadzenie transformacji kanonicznej (uogólniona transformacja Lee-Low-Pine), która znacząco upraszcza analizowany model. Pozwala ona nie tylko na większą wydajność obliczeń z użyciem metod numerycznych, ale też prowadzi do lepszego zrozumienia analizowanego problemu.

**Abstract**

In the thesis, I analyze a system of several fermions interacting via contact interactions with a single finite-mass impurity in a one-dimensional harmonic potential. The studies are motivated by state-of-the-art experiments with ultracold atoms in which such systems were created for the mass-balanced case. I focus on systems with heavy impurity in a regime of strong repulsive interactions. As part of the analysis, I determine energies and density profiles for the system in the many-body ground state and low-excited states. The most important result of my thesis is the derivation of the canonical transformation (the generalized Lee-Low-Pine transformation), which significantly simplifies the analyzed model. It allows not only to improve the efficiency of numerical calculations but also leads to a better understanding of the analyzed problem.

Przedłożoną rozprawę doktorską napisałem na podstawie wyników opublikowanych w pracy:

- D. Włodzyński
  *Several fermions strongly interacting with a heavy mobile impurity in a one-dimensional harmonic trap*
  Phys. Rev. A **106**, 033306 (2022).

Jest to uwieńczenie 4 lat studiów w Warszawskiej Szkole Doktorskiej Nauk Ścisłych i Bio-Medycznych. W trakcie tych studiów opublikowałem również dwa inne artykuły:

- D. Włodzyński, D. Pęcak, T. Sowiński
  *Geometry-induced entanglement in a mass-imbalanced few-fermion system*
  Phys. Rev. A **101**, 023604 (2020),

- D. Włodzyński, T. Sowiński
  *Few strongly interacting fermions of different mass driven in the vicinity of a critical point*
  Phys. Rev. A **104**, 053317 (2021).

Moje studia doktorskie zostały zrealizowane dzięki częściowemu wsparciu finansowemu Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu SONATA BIS 2016/22/E/ST2/00555.

## Podziękowania

Pragnę serdecznie podziękować mojemu Promotorowi dr. hab. Tomaszowi Sowińskiemu za nieocenioną pomoc i opiekę naukową. Dziękuję również wszystkim pracownikom Instytutu Fizyki PAN, za tworzenie życzliwej atmosfery pracy.

Chciałbym także podziękować mojej mamie Annie za to, że zawsze mnie wspierała.

# Spis treści

**1 Wstęp** **1**

1.1 Tło historyczne . . . . . 1
1.2 Układy jednowymiarowe . . . . . 5
1.3 Oddziaływania międzyatomowe . . . . . 5
1.4 Mieszaniny fermionowe . . . . . 7
1.5 Fizyka kilku silnie skorelowanych ciał . . . . . 9
1.6 Niejednorodność w morzu Fermiego . . . . . 10

**2 Metody analityczne** **12**

2.1 Separacja środka masy . . . . . 12
2.2 Transformacja Lee-Low-Pine . . . . . 14
2.3 Dwa atomy w potencjale harmonicznym . . . . . 16

**3 Uogólnienie transformacji LLP** **18**

3.1 Sformułowanie problemu . . . . . 18
3.1.1 Mieszana kwantyzacja . . . . . 21
3.2 Transformacja współrzędnych . . . . . 22
3.3 Transformacja hamiltonianu . . . . . 25

**4 Analiza numeryczna** **28**

4.1 Ścisła diagonalizacja . . . . . 28
4.2 Porównanie metod . . . . . 30

**5 Własności stanów własnych** **35**

5.1 Energie własne . . . . . 35
5.2 Profile gęstości . . . . . 39

**6 Kierunki dalszych prac i podsumowanie** **43**

6.1 Wyższe funkcje korelacji . . . . . 43
6.2 Dynamika . . . . . 44
6.3 Podsumowanie . . . . . 46

**Literatura** **48**

# 1 Wstęp

## 1.1 Tło historyczne

Historia badań nad ultrazimnymi gazami atomowymi ma swój początek w rozważaniach teoretycznych z lat 20. XX wieku. Z jednej strony, badania nad zjawiskiem promieniowania ciała doskonale czarnego doprowadziły do odkrycia, że promieniowanie elektromagnetyczne składa się z niepodzielnych części, zwanych fotonami. Co więcej, jak pokazał Satyendra Nath Bose w 1924 roku, kwanty te podlegają innej statystyce niż klasyczne cząstki i są opisywane rozkładem Bosego-Einsteina [2]. Z drugiej strony, analiza układów wieloelektronowych pokazała, że elektrony również nie zachowują się jak klasyczne cząstki. Przeciwnie, podlegają rozkładowi Fermiego-Diraca, co odkryli Paul Dirac i Enrico Fermi w 1926 roku [3, 4]. Z czasem stało się jasne, że jest to ogólna własność cząstek elementarnych. Wszystkie nierozróżnialne cząstki w trójwymiarowej przestrzeni muszą podlegać statystyce bozonowej bądź fermionowej. W przypadku cząstek złożonych, warunek nierozróżnialności nigdy nie jest ściśle spełniony, ale w pewnych przypadkach obowiązuje z dobrym przybliżeniem. Ważnym przykładem takiej sytuacji są rozrzedzone gazy atomowe. Gdy atomy w gazie mają taki sam stan wewnętrzny (a ich zderzenia nie prowadzą do zmiany tego stanu), można je traktować jako identyczne cząstki. To czy podlegają statystyce bozonowej czy fermionowej zależy od sumarycznej liczby protonów, neutronów i elektronów, z których się składają. Jeżeli jest ona parzysta mamy się do czynienia z atomami bozonowymi, w przeciwnym wypadku są to atomy fermionowe. Oznacza to, że nawet w obrębie jednego pierwiastka chemicznego różne izotopy mogą podlegać różnej statystyce. Przykładowo, stosowane w eksperymentach z ultrazimnymi gazami atomy potasu występują w postaci trzech izotopów, dwa z nich są bozonowe ($^{39}$K i $^{41}$K), a jeden fermionowy ($^{40}$K).

W latach 1924-25 Albert Einstein zastosował rozkład Bosego-Einsteina do opisu gazu doskonałego [5], co doprowadziło do niecodziennego odkrycia. Okazało się, że dla odpowiednio niskich temperatur w układzie dochodzi do nieznanej wcześniej przemiany fazowej. Rodzaj tej przemiany w klasyfikacji Ehrenfesta zależy od kształtu potencjału pułapkującego. W jednorodnym potencjale jest to przemiana trzeciego rodzaju [6]. Co ważne przemiana zachodzi pomimo braku oddziaływań. W jej wyniku makroskopowa część atomów zaczyna obsadzać stan o najniższej energii jednocząstkowej. Dzieje się to na przekór tego, że w temperaturze przejścia energia termiczna jest wciąż znacznie wyższa niż energie wzbudzeń w gazie. Tę nową fazę materii nazwano kondensatem Bosego-Einsteina. Początkowo odkrycie to było traktowane jako teoretyczna ciekawostka. Wprawdzie ten efekt powinien być możliwy do zaobserwowania dla atomów bozonowych, ale ówczesne technologie nie pozwalały na schładzanie gazów do wymaganych temperatur. Wszystko zmieniło się wraz z rozwojem nowych

technik chłodzenia i pułapkowania atomów w drugiej połowie XX wieku.

Eksperymenty z zimnymi atomami stały się możliwe dzięki opanowaniu metody chłodzenia laserowego opracowanej w Bell Labs w 1985 roku [7]. W podstawowej wersji tej techniki, zwanej chłodzeniem dopplerowskim, w chmurę atomową wymierzone jest sześć wiązek laserowych, po dwie przeciwległe wiązki w trzech wzajemnie prostopadłych kierunkach. Częstotliwość laserów jest dobrana tak, aby była ona nieznacznie niższa niż jedno z dozwolonych przejść elektronowych w chłodzonych atomach. W układzie odniesienia związanym z poruszającym się atomem, ta częstotliwość jest przesunięta ze względu na efekt Dopplera - rośnie/maleje, gdy atom zbliża/oddala się do źródła wiązki. To przesunięcie powoduje, że atom wchodzi w rezonans jedynie z wiązkami skierowanymi przeciwnie do kierunku jego ruchu i dochodzi do absorpcji fotonu. Zaabsorbowane fotony przekazują atomowi swój pęd, w wyniku czego atom zwalnia w laboratoryjnym układzie odniesienia. Następnie dochodzi do spontanicznej emisji fotonu w losowym kierunku, co również wpływa na pęd atomu. Gdy do tego procesu dochodzi wielokrotnie, zmiana pędu spowodowana przez absorpcje kumuluje się, natomiast wpływ z emisji uśrednia się prawie do zera. Efektywnie na atomy działa siła proporcjonalna do ich prędkości, ale o przeciwnym zwrocie. Prowadzi to do spadku energii kinetycznej atomów, a tym samym maleje temperatura gazu.

W pewnym momencie wpływ emisji wymuszonej na opisany powyżej proces chłodzenia zaczyna być istotny i narzuca ograniczenie na to jak bardzo można obniżyć temperaturę gazu. W szczególności, atomy nie mogą być w ten sposób schłodzone poniżej tak zwanej temperatury odrzutu (ang. recoil temperature). Jest to temperatura, przy której średnia energia kinetyczna atomu odpowiada pojedynczej emisji fotonu. W podstawowej metodzie chłodzenia laserowego istnieje dodatkowe ograniczenie wyrażone przez tzw. temperaturę Dopplera. Jest ona związana ze skończoną szerokością widma absorpcyjnego. Ta temperatura, rzędu setek mikrokelwinów, jest znacznie wyższa od temperatury odrzutu (rzędu 0.1-1 $\mu$K). Początkowo wydawało się, że jest to faktyczna granica dla wszystkich metod chłodzenia tego rodzaju. Jak jednak pokazały eksperymenty poczynając od 1988 roku [8], można uzyskać temperatury subdopplerowskie stosując lasery z gradientem polaryzacji, np. gdy przeciwstawne lasery w układzie doświadczalnym mają prostopadłe polaryzacje. Okazało się, że ograniczenie temperaturą Dopplera wynikało z uproszczonego modelowania atomu jako układu dwupoziomowego. Rzeczywiste atomy mają bardziej skomplikowaną strukturę. Przykładowo, atomy alkaliczne mają zdegenerowany stan podstawowy, który rozszczepia się pod wpływem światła laserowego o kołowej polaryzacji. W oparciu o tą własność opracowano dla nich metodę zwaną chłodzeniem syzyfowym [9], która pozwoliła schładzać gazy atomowe znacząco poniżej temperatury Dopplera.

Aby chłodzić atomy opisaną powyżej metodą, trzeba je uwięzić w przestrzeni między

wiązkami laserowymi. W eksperymentach, gazy jednoatomowe są otrzymywane poprzez sublimację w piecu. Uzyskana w ten sposób wiązka atomów osiąga prędkości rzędu km/s i musi być wstępnie spowolniona zanim trafi do pułapki. W tym celu wynaleziono w 1982 roku spowalniacz Zeemana [10]. Urządzenie to składa się z pojedynczego lasera skierowanego przeciwnie do ruchu wiązki atomów oraz z cewki z gradientem gęstości uzwojenia. Gdy częstotliwość lasera jest dopasowana do energii dozwolonego przejścia w atomie dochodzi do absorpcji fotonu, co spowalnia wiązkę atomową. Niestety, ze względu na efekt Dopplera, długość fali wymagana do uzyskania rezonansu zmienia się wraz z prędkością atomu. Żeby zniwelować ten efekt, atomy przepuszcza się przez cewkę magnetyczną. W polu magnetycznym poziomy energetyczne w atomach przesuwają się (efekt Zeemana), co zmienia częstotliwość rezonansową. Przy odpowiednio dobranym uzwojeniu cewki, pole magnetyczne maleje proporcjonalnie do prędkości wiązki atomowej i efekty balansują się. W konsekwencji atomy zwalniają do akceptowalnego poziomu i mogą zostać uwięzione.

Historycznie pierwszym układem do pułapkowania neutralnych atomów była opracowana w 1985 roku pułapka magneto-optyczna [11]. Wykorzystuje się w niej układ sześciu laserów używanych do chłodzenia atomów w połączeniu z dwiema cewkami magnetycznymi. Lasery wywierają na atomy efektywną siłę proporcjonalną do ich prędkości, więc nie ograniczają gazu przestrzennie. Cewki ustawione są w takiej konfiguracji, aby generować minimum pola magnetycznego w centrum pułapki. Gdy atom oddala się od centrum pułapki, rosnące pole magnetyczne przesuwa poziomy energetyczne, prowadząc do rezonansu z wiązką laserową. Efektywnie, wywiera to siłę na atomy, proporcjonalną do odległości od centrum pułapki. Oznacza to, że lasery jednocześnie chłodzą i pułapkują gaz. Niestety, nawet z pomocą chłodzenia syzyfowego, uzyskane temperatury są za wysokie, by doszło do kondensacji Bosego-Eisteina.

Ostatnim krokiem na drodze do osiągnięcia temperatury kondensacji jest tzw. chłodzenie przez odparowanie. W tym celu zmniejsza się gradient pola magnetycznego, częściowo otwierając pułapkę. Wówczas atomy o największej energii kinetycznej uciekają z układu, a co za tym idzie pozostały w pułapce gaz ma niższą średnią energię na jedną cząstkę. Po doprowadzeniu układu do równowagi oznacza to, że gaz ma niższą temperaturę. W tej metodzie co prawda traci się część gazu, niemniej jednak atomy są schłodzone poniżej temperatury kondensacji. W tym miejscu warto dodać, że za rozwój technik chłodzenie i pułapkowania atomów, Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji oraz William D. Phillips otrzymali nagrodę Nobla w 1997 roku.

Zastosowanie powyższych technik eksperymentalnych pozwoliło na utworzenie kondensatu Bosego-Einsteina. Dwie pierwsze grupy badawcze dokonały tego w 1995 roku - jedna używając atomów rubidu $^{87}$Rb [12], druga z użyciem atomów sodu $^{23}$Na [13]. Obie zostały

wyróżnione nagrodą Nobla w 2001 roku. Eksperymenty w reżimie ultrazimnych temperatur nie ograniczały się tylko do atomów bozonowych. Druga grupa atomów, podlegająca rozkładowi Fermiego-Diraca, również była schładzana. W przypadku atomów fermionowych, więcej niż jedna cząstka nie może obsadzać tego samego stanu. W związku z tym, gdy temperatura układu zbliża się do zera absolutnego, jednocząstkowe stany własne potencjału pułapkującego są zapełniane poczynając od stanów z najniższą energią, po jednym atomie na stan. Tę nietypowa fazę materii nazwano zdegenerowanym gazem fermionowym. Po raz pierwszy udało się go uzyskać w eksperymencie z atomami potasu $^{40}$K w 1999 roku [14].

Pułapka magneto-optyczna pozwoliła na utworzenie pierwszego kondensatu, ale ma też ograniczenia techniczne. W szczególności, używanie pól magnetycznych do pułapkowania atomów utrudnia ich stosowanie do manipulowania innymi własnościami układu w eksperymentach. Ten problem rozwiązuje zastosowana po raz pierwszy w 1986 roku pułapka dipolowa [15]. Wykorzystuje się w niej lasery o częstotliwości dalekiej od przejść rezonansowych. Tym samym nie dochodzi do absorpcji fotonów. Oscylujące pole elektryczne przesuwa natomiast poziomy energetyczne w atomach proporcjonalnie do intensywności wiązki. Oznacza to, że na atomy wywierana jest siła proporcjonalna do gradientu tej intensywności. Gaz jest przyciągany bądź wypychany z maksimum wiązki, w zależności od użytej częstotliwości lasera. Najprostsza pułapka wykorzystuje pojedynczą skupioną wiązkę lasera z atomami więzionymi w ognisku. Pułapki dipolowe dają dużo większą swobodę przy prowadzeniu eksperymentów na ultrazimnych atomach. Z drugiej strony, generowany przez nie efektywny potencjał pułapkujący jest płytszy, więc w doświadczeniach zazwyczaj najpierw schładza się atomy w pułapce magneto-optycznej, po czym transportuje się je do pułapki dipolowej celem dalszych badań.

Współcześnie, ultrazimne gazy wyróżniają się na tle innych układów fizycznych wysokim poziomem doświadczalnej kontroli. Z jednej strony, ekstremalnie niskie temperatury powodują, że wzbudzenia termiczne nie mają aż tak dużego znaczenia i układ znajduje się niemalże w stanie podstawowym. Z drugiej strony gaz jest znakomicie izolowany od otoczenia, co pozwala modelować go jako zamknięty układ kwantowy. Dodatkowo, pułapki dipolowe dają dużą swobodę w manipulowaniu kształtem potencjału pułapkującego. Dzięki temu możliwa jest na przykład eksperymentalna realizacja układów o zredukowanej wymiarowości. Precyzyjnie kontrolować można również efektywne oddziaływania między atomami. Z powyższych względów układy ultrazimnych gazów są fenomenalnym narzędziem do symulowania innych układów fizycznych (tak zwane symulatory kwantowe), co jest obecnie jednym z ich głównych zastosowań [16, 17].

## 1.2 Układy jednowymiarowe

Fundamentalnie, przestrzeń jest trójwymiarowa i wszystkie procesy fizyczne zachodzą właśnie w tylu wymiarach. Możliwe jest jednak utworzenie układów, w których cała nietrywialna fizyka zachodzi tylko w jednym bądź dwóch wymiarach przestrzennych. W przypadku ultrazimnych gazów ten efekt można uzyskać dobierając odpowiednio potencjał pułapkujący. W kierunkach, w których ma zostać zredukowana wymiarowość problemu należy zastosować potencjał harmoniczny o bardzo dużej częstotliwości. Jeżeli energie wzbudzeń w tych kierunkach są dużo większe od innych charakterystycznych energii w układzie (energia termiczna, energia oddziaływań, itd.), odpowiadająca im składowa stanu kwantowego jest w stanie podstawowym i nie może zostać wzbudzona. W konsekwencji dynamika w tym kierunku jest zamrożona i układ ma efektywnie jeden wymiar mniej. Ta zasada została wykorzystana do utworzenia jedno- i dwuwymiarowego kondensatu Bosego-Einsteina w 2001 roku [18].

W kontekście tej rozprawy szczególnie ważne są układy ultrazimnych gazów w jednowymiarowym potencjale harmonicznym. Doświadczalnie, takie układ mogą być realizowane przy pomocy pułapki dipolowej złożonej z pojedynczej skupionej wiązki lasera. Ważne jest, aby wiązka była wystarczająco wąska w ognisku, co przekłada się na dużą radialną częstotliwość pułapki. Pod względem teoretycznym, jednowymiarowe gazy bozonowe były analizowane na długo zanim dało się je uzyskać eksperymentalnie [19]. Od swoich wyżej wymiarowych odpowiedników wyróżniają się tym, że w skończonych temperaturach nie dochodzi w nich do kondensacji Bosego-Einsteina. Warto nadmienić, że w przypadku skończonej liczby cząstek zachodzi proces analogiczny do omawianego tu przejścia fazowego, jednak gdy układ dąży do granicy termodynamicznej, temperatura przejścia dąży do zera [20]. Sytuacja wygląda podobnie dla dwuwymiarowego gazu w pustej przestrzeni, ale w tym wypadku dodanie harmonicznego potencjału pułapkującego umożliwia powstanie kondensatu.

## 1.3 Oddziaływania międzyatomowe

Jak pokazał przykład kondensacji Bosego-Einsteina, nawet nieoddziałujące gazy atomowe mogą być interesującym obiektem badań w reżimie ultraniskich temperatur. Jednak prawdziwe bogactwo fizyki tych układów ujawnia się, gdy do problemu doda się oddziaływania. Atomy, pomimo że są elektrycznie obojętne i nie mają trwałego elektrycznego momentu dipolowego, wpływają na siebie poprzez wzajemne indukowanie swoich momentów dipolowych. Jest to bardzo słabe oddziaływanie przyciągające, które zmienia się odwrotnie proporcjonalnie do szóstej potęgi odległości pomiędzy atomami. Gdy atomy odpowiednio się zbliżą, dochodzi do przykrycia ich chmur elektronowych i zaczynają się odpychać. Ze względu na szybkość ich zanikania, oddziaływania te mogą być traktowane jako krótkozasięgowe. In-

nymi słowy można przyjąć, że istnieje pewna skończona odległość powyżej której atomy nie oddziałują ze sobą. Warto wspomnieć, że w eksperymentach z ultrazimnymi gazami mogą występować również oddziaływania dalekozasięgowe. Przykładem są atomy z dużym permanentnym momentem magnetycznym, takie jak chrom czy dysproz [21], a także atomy Rydbergowskie [22]. Jednak takie oddziaływania wykraczają poza zakres mojej rozprawy.

W rozrzedzonych gazach atomowych znalezienie więcej niż dwóch cząstek blisko siebie jest mało prawdopodobne, a więc można założyć, że dany atom oddziałuje krótkozasięgowo co najwyżej z jednym innym atomem na raz. W związku z tym zderzenia wielociałowe są pomijalne, a oddziaływania międzyatomowe mogą być opisywane z użyciem wyłącznie dwuciałowych kolizji. Do tego opisu wykorzystuje się teorię rozpraszania. Rozważmy dwie oddziałujące krótkozasięgowo cząstki, które zderzają się w pustej przestrzeni. Ich funkcję falową można podzielić na część opisującą ruch środka masy, która jest falą płaską, oraz na część ruchu względnego. Gdy cząstki są daleko od siebie, funkcja falowa ruchu względnego jest superpozycją dwóch fal - fali płaskiej odpowiadającej niezaburzonemu ruchowi cząstek oraz fali rozproszonej:

$$\psi(r) = e^{ikz} - f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \ , \tag{1}$$

gdzie $k$ to względny pęd cząstek wyrażony za pomocą liczby falowej, a $z$ to kierunek, w którym zachodzi zderzenie. Funkcja $f()$ opisuje amplitudę fali rozproszonej w wyniku kolizji. Jeżeli oddziaływania są sferycznie symetryczne, ta funkcja zależy tylko od kąta rozpraszania. W reżimie ultrazimnych temperatur te kolizje są niskoenergetyczne, tzn. $k$ dąży do zera. Pozwala to uprościć funkcje falową do postaci $\psi(r) = 1 - \frac{a}{r}$, gdzie $a$ to długość rozpraszania. Oznacza to, że niezależnie jak skomplikowane jest oddziaływanie, kolizje dwuciałowe są opisywane za pomocą pojedynczego parametru. To przekłada się na efektywny opis oddziaływań międzycząstkowych. Dla ultrazimnych, rozrzedzonych gazów atomowych można przybliżyć je przez oddziaływania kontaktowe proporcjonalne właśnie do długości rozpraszania.

Uproszczony opis oddziaływań krótkozasięgowych przekłada się też na układy quasi-jednowymiarowe. Zgodnie z poprzednim podrozdziałem, są to układy w których gaz atomowy jest uwięziony w dwóch z trzech wymiarach przez potencjał harmoniczny o dużej częstotliwości. W tym wypadku trójwymiarowe oddziaływanie kontaktowe może być zastąpione przez swój jednowymiarowy odpowiednik (potencjał delty Diraca)

$$U_{\text{efektywne}}(r) = g\delta(r) \ , \tag{2}$$

gdzie $g = -\frac{2\hbar^2}{ma_{1\text{D}}}$ ($m$ to masa atomów). W tym wypadku siła oddziaływań jest odwrotnie proporcjonalna do jednowymiarowego odpowiednika długości rozpraszania. Współczynnik $a_{1\text{D}}$ jest powiązany z oryginalną długością rozpraszania równaniem $a_{1\text{D}} = \frac{a_\perp^2}{2a}\left(1 - C\frac{a}{a_\perp}\right)$, gdzie

bezwymiarowa stała matematyczna $C$ jest równa około 1.4603 [23]. Występująca w równaniu długość $a_\perp$ jest odwrotnie proporcjonalna do częstości potencjału pułapkującego w kierunkach prostopadłych do jednowymiarowego układu. Oznacza to, że regulując tą częstością można manipulować efektywną siłą oddziaływań międzyatomowych. Taka metoda kontroli oddziaływań ma jednak mały zakres zastosowań, chociażby przez to, że w zbyt szerokiej pułapce przybliżenie quasi-jednowymiarowe przestałoby obowiązywać.

Na szczęście istnieje bardziej użyteczna technika kontrolowania efektywnej siły oddziaływań w eksperymentach. Jej zrozumienie wymaga bardziej dogłębnej analizy problemu zderzeń dwuciałowych. Kształt potencjału oddziaływania między dwoma atomami zależy od ich struktury elektronowej. Oznacza to, że przebieg kolizji jest inny dla różnych wenętrznych stanów atomów. W teorii rozpraszania opisuje się to za pomocą kanałów rozproszeniowych. Te kanały nie są niezależne i kolizja może spowodować zmianę stanu wewnętrznego atomów. Jeżeli po zderzeniu cząstki mają wystarczającą energię, żeby się rozproszyć, mówi się, że kanał jest otwarty. Może się jednak zdarzyć, że po kolizji atomy są w relatywnie wysokoenergetycznym stanie wewnętrznym i nie mają wystarczającej energii kinetycznej żeby się rozproszyć. Wówczas jest to kanał zamknięty. Sprzężenie między kanałem otwartym i kanałami zamkniętymi jest zazwyczaj pomijalnie małe. Wyjątek stanowi sytuacja gdy energia rozpraszania jest zbliżona do energii stanu związanego w którymś kanale zamkniętym. Wówczas dochodzi do silnego sprzężenia między kanałami, co przejawia się zmianą efektywnych oddziaływań międzyatomowych. Ten efekt nazywa się rezonansem Feshbacha. W eksperymentach z ultrazimnymi atomami, energię stanów związanych w kanałach zamkniętych można precyzyjnie kontrolować za pomocą pola magnetycznego. Pozwala to na uzyskanie dowolnej siły oddziaływań, od silnie przyciągających do silnie odpychających. Innymi słowy, dzięki tej technice, siła oddziaływań jest parametrem, który można swobodnie i dość łatwo modyfikować.

## 1.4 Mieszaniny fermionowe

Eksperymenty z ultrazimnymi atomami nie ograniczają się tylko do gazów jednoskładnikowych. Możliwe jest też uzyskiwanie mieszanin różnych gazów atomowych. Składnikami mogą być atomy różnych pierwiastków [24, 25, 26] jak również różne izotopy tego samego pierwiastka [27, 28]. Atomy różniące się wyłącznie strukturą nadsubtelną również są wzajemnie rozróżnialne i zachowują się jak odrębne składniki mieszaniny. Oznacza to, że można tworzyć mieszaniny ze składnikami o różnych, jak i o równych masach. W przypadku jednoskładnikowym istniały tylko dwie możliwości - gazy bozonowe i fermionowe. W mieszaninach mogą występować różne kombinacje tych dwóch typów cząstek. Znacząco zwiększa to różnorod-

ność takich układów. Przykładowo, dla dwuskładnikowej mieszaniny bozonowo-bozonowej oddziałującej kontaktowo, układ ma trzy różne parametry siły oddziaływań. Manipulując tymi parametrami można tworzyć układy o przeróżnych własnościach. Przykładem o dość nieoczekiwanych własnościach są niedawno odkryte krople kwantowe [29], w których, poprzez połączenie odpychających oddziaływań wewnątrzskładnikowych oraz przyciągających oddziaływań międzyskładnikowych powstaje wielociałowa struktura kwantowa, która samodzielnie stabilizuje swój rozmiar (nie rozpada się ani nie zapada).

W przypadku fermionów wzrost złożoności zagadnienia dla mieszanin wieloskładnikowych względem jednoskładnikowego gazu jest jeszcze bardziej dosadny. Atomy w gazie fermionowym, ze względu na swoją statystykę, nie mogą znajdować się w tym samym miejscu. Oznacza to, że nie mogą ze sobą oddziaływać kontaktowo w kanale symetrycznym (s-wave). W związku z tym, jeżeli w układzie nie występują oddziaływania o skończonym zasięgu, a inne kanały rozpraszania są zaniedbywalne (np. p-wave), fermiony w jednoskładnikowym gazie nie oddziałują ze sobą. Dopiero dołączenie drugiego składnika pozwala stworzyć układ z oddziaływaniami o zerowym zasięgu. Ważnym przykładem takich układów są mieszaniny fermionowo-fermionowe złożone z atomów o równych masach (różniących się stanem nadsubtelnym), realizowane między innymi dla atomów litu $^6$Li [30, 31] oraz potasu $^{40}$K [32]. Takie układy są intensywnie badane, ponieważ odzwierciedlają zachowanie elektronów, które również mogą być w jednym z dwóch stanów wewnętrznych ze względu na spin. Jednocześnie, w eksperymentach z ultrazimnymi atomami badacze mają dużo większą kontrolę nad parametrami układu niż przy badaniu elektronów w ciałach stałych. Oznacza to, że ultrazimne gazy mogą być narzędziem do symulowania egzotycznych zjawisk, które obserwuje się w kryształach. W takich badaniach zwykle wykorzystuje się układy ultrazimnych atomów umieszczonych w tak zwanych sieciach optycznych [33]. W tym przypadku, z użyciem przeciwstawnych wiązek laserowych, tworzone są fale stojące działające na atomy jak periodyczny potencjał, analogiczny do tego w ciałach stałych. Niemniej mieszaniny w pułapkach harmonicznych również pomagają w lepszym zrozumieniu fizyki ciała stałego. Przykładowo, tworząc mieszaniny ze słabym przyciąganiem międzyskładnikowym można symulować pary Coopera, analogiczne do tych występujących w nadprzewodnikach. Poprzez zwiększanie sił przyciągających można doprowadzić do kondensacji Bosego-Einsteina par fermionów [34].

Oprócz siły oddziaływania, można też kontrolować stosunek liczby atomów w poszczególnych składnikach. W ten sposób można tworzyć mieszaniny z dominującym wkładem jednego nadsubtelnego stanu. W analogii do elektronów w ciałach stałych odpowiada to różnicy w potencjale chemicznym dla elektronów o przeciwnych kierunkach spinu, co przekłada się na różnicę wysokości poziomów Fermiego. Pozwala to między innymi otrzymać odpowiednik fazy Fulde-Ferrella-Larkina-Ovchinnikova (FFLO) [35, 36], egzotycznej fazy

materii, która występuje w nadprzewodnikach umieszczonych w silnym polu magnetycznym. Kolejnym parametrem, który można kontrolować w ultrazimnych mieszaninach jest stosunek mas składników. Masowo niezbalansowane mieszaniny uzyskuje się poprzez użycie atomów fermionowych różnych pierwiastków/izotopów. Kontrola tego parametru jest ograniczona ze względu na niewielką liczbę różnych atomów fermionowych, które można schłodzić do wymaganych temperatur.

## 1.5 Fizyka kilku silnie skorelowanych ciał

Mieszaniny ultrazimnych gazów są zazwyczaj układami wielociałowymi, składającymi się z wielu tysięcy atomów. Jednak, jak pokazały eksperymenty przeprowadzone przez grupę S. Johima [37, 38, 39], możliwe jest też przygotowanie układów kilkuatomowych. Pierwszym etapem w takich eksperymentach jest schłodzenie gazu do ultrazimnych temperatur z użyciem standardowych metod. Gaz składa się z atomów litu $^6$Li w dwóch różnych stanach nadsubtelnych, a więc jest to mieszanina fermionowo-fermionowa. W następnym kroku kilkaset atomów jest przetransportowanych do jednowymiarowej pułapki dipolowej składającej się z pojedynczej, skupionej wiązki lasera. Ze względu na fermionową naturę atomów, w każdym stanie własnym pułapki mogą znajdować się co najwyżej dwa atomy o różnych stanach nadsubtelnych. Następnie wytworzony zostaje gradient pola magnetycznego. W wyniku tego na atomy działa dodatkowy liniowy potencjał, który częściowo otwiera pułapkę i uwalnia większość atomów. Po wyłączeniu pola magnetycznego w pułapce pozostaje tylko kilka atomów, które zajmują stany o najniższej energii. Poprzez odpowiedni dobór pól magnetycznych, badacze mają kontrolę nad liczbą atomów w układzie. W praktyce można tworzyć kilkuatomowe mieszaniny ze z góry ustaloną liczbą atomów (do 10). Tego typu eksperymenty stały się motywacją do teoretycznych analiz ultrazimnych mieszanin kilku ciał (szczegóły w artykułach przeglądowych, np. [40] dla układów trójwymiarowych oraz [41, 42, 43] dla układów o ograniczonej wymiarowości).

Jedną z własności, która odróżnia wielociałowe układy kwantowe od tych opisywanych klasycznie jest występowanie wewnętrznych kwantowych korelacji. W sytuacji gdy dwie, wcześniej odizolowane cząstki zaczynają ze sobą oddziaływać ich stan nie jest już opisywany jako iloczyn funkcji falowych poszczególnych cząstek. Jest to zjawisko istotne dla małych układów, ale w przypadku makroskopowym jest zazwyczaj pomijalne. Niemniej istnieją materiały, w których efekty związane z korelacjami kwantowymi nie zanikają wraz z rozmiarem układu i mają istotny wpływ na ich makroskopowe właściwości. Takie układy nazywa się silnie skorelowanymi. Badania nad nimi przełożyły się na wzrost zainteresowania mieszaninami fermionów, które mogą być użyte jako kwantowe symulatory takich materiałów.

W przypadku mieszanin fermionowych, układy silnie skorelowane można uzyskać za pomocą silnych oddziaływań międzyskładnikowych.

## 1.6 Niejednorodność w morzu Fermiego

Szczególnym przypadkiem mieszanin fermionowych są układy, w których pojedyncza cząstka jest zanurzona w morzu fermionów. To zagadnienie nazywane jest problemem polaronu fermionowego. Kilkuciałowy odpowiednik tego zagadnienia jest nazywany natomiast **problemem małego polaronu fermionowego**. Nazwa wywodzi się od quasi-cząstki używanej do jego opisu. Polaron fermionowy to efektywna cząstka powstająca, gdy niejednorodność jest „ubrana" we wzbudzenia morza Fermiego. Przykładem układu, który może być modelowany jako taka mieszanina jest niemagnetyczny metal z magnetyczną domieszką. W takim układzie morzem Fermiego są elektrony przewodzące, a niejednorodnością magnetyczny atom. W tym przypadku, rozpraszanie się elektronów na atomach domieszki modyfikuje zależność temperaturową oporu elektrycznego materiału (tzn. efekt Kondo)[44]. Niestety, opis w języku quasi-cząstek załamuje się, gdy układ jest jednowymiarowy [45].

Ultrazimne gazy są doskonałym narzędziem do badania problemu polaronu. Układy fermi-polaronowe zostały w nich zrealizowane doświadczalnie zarówno w dwóch [46], jak i trzech wymiarach [47, 48]. Szczególnie warty uwagi jest eksperyment z 2013 roku [39], w którym stworzono mieszaninę złożoną z jednego atomu litu $^6$Li zanurzonego w morzu atomów tego samego izotopu (ale w innym stanie nadsubtelnym). Mieszanina była uwięziona w jednowymiarowym potencjale harmonicznym. Korzystając z rezonansu Feshbacha układ był analizowany dla różnych sił międzyskładnikowych, w tym dla silnych oddziaływań. Ten przykład pokazuje potencjał eksperymentów z ultrazimnymi atomami przy poruszaniu problemu polaronu fermionowego. Można spekulować, że w przyszłości to doświadczenie będzie można powtórzyć dla składników o różnych masach poprzez użycie atomów różnych pierwiastków.

Wyniki eksperymentalne dla jednowymiarowego układu z niejednorodnością oddziałującą z kilkoma fermionami stały się motywacją do badań teoretycznych nad tymi mieszaninami [49, 50, 51, 52, 53]. Analizy nie ograniczały się tylko do atomów w potencjale harmonicznym. Zajmowano się również analogicznymi mieszaninami w sieciach optycznych [54], podwójnych studniach potencjału [55], czy połączeniu harmonicznego i periodycznego potencjału [56]. W końcu, analizowano też układy z różnicą mas między składnikami, zarówno dla ciężkiej [57, 58] jak i lekkiej niejednorodności [59, 60].

Niniejsza rozprawa również jest częścią tego trendu. Analizowana jest w niej mieszanina ultrazimnych atomów uwięziona w jednowymiarowej pułapce harmonicznej o częstości $\omega$.

Mieszanina składa się z $N$ jednakowych fermionów o masie $m$ oraz pojedynczej ciężkiej niejednorodności o masie $M > m$. Fermiony i niejednorodność oddziałują ze sobą kontaktowo z efektywną siłą $g$. Oddziaływania są silnie odpychające. Hamiltonian układu ma postać:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{M\omega^2 y^2}{2} + \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2 x_i^2}{2} + g\delta(y - x_i)\right] . \tag{3}$$

Ze względu na silne oddziaływania, analiza układów tego rodzaju przysparza wiele trudności. W związku z tym, w mojej rozprawie zaprezentuję specjalnie dobraną transformację, która znacząco upraszcza ten problem. Zacznę jednak od przedstawienia znanych metod analitycznych używanych przy analizie pokrewnych zagadnień.

# 2 Metody analityczne

## 2.1 Separacja środka masy

Analizowany w mojej rozprawie problem polaronu fermionowego jest szczególnym przypadkiem zagadnienia wielu ciał, które w różnych formach występuje w wielu różnych obszarach fizyki. W ogólności, układ $N$ cząstek z oddziaływaniami dwuciałowymi jest opisywany hamiltonianem w postaci:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \hat{V}_{ij} \left( \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \right) \ . \tag{4}$$

Zakładane jest tu, że oddziaływania zależą wyłącznie od względnych odległości między cząstkami $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. Analiza takich układów nie jest prostym zadaniem. Szczególne trudności sprawia reżim silnych oddziaływań, w którym zawodzą metody takie jak rachunek zaburzeń czy przybliżenie pola średniego. Nawet w przypadku, gdy liczba cząstek jest niewielka, mamy do czynienia z szeregiem silnie sprzężonych ze sobą równań ruchu, które zazwyczaj nie mają analitycznego rozwiązania. Z drugiej strony, w układach kilkuciałowych realistyczną możliwością stają się metody bezpośrednie (ang. brute force), w których hamiltonian jest częściowo diagonalizowany numerycznie bez uprzednich przekształceń z użyciem metod analitycznych. W rezultacie znajduje się niskoenergetyczne stany własne z dowolnie dużą dokładnością. Wadą tego podejścia jest olbrzymie zużycie zasobów obliczeniowych, które gwałtownie rośnie wraz ze wzrostem liczby cząstek, jak i przy zwiększaniu siły oddziaływań. Na szczęście istnieją metody analityczne, które mogą wstępnie uprościć problem zanim przystąpi się do analizy numerycznej. Jedną z nich jest tak zwana separacja środka masy.

Środek masy jest definiowany jako geometryczny punkt, którego położenie jest średnią ważoną położeń wszystkich cząstek w układzie:

$$\hat{\mathbf{R}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{m_i}{M} \hat{\mathbf{x}}_i \tag{5}$$

gdzie $M = m_1 + m_2 + ... + m_N$ to całkowita masa układu. Jego szczególną cechą jest to, że w układzie izolowanym (tzn. gdy na cząstki nie działają żadne zewnętrzne oddziaływania) środek masy zachowuje się jak cząstka swobodna, której pęd jest równy sumie pędów cząstek w układzie:

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{p}}_i \ . \tag{6}$$

Tak zdefiniowane operatory położenia i pędu spełniają kanoniczną relację przemienności

$[\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar\hat{\mathbf{1}}$, a więc są poprawnymi zmiennymi kanonicznymi. W takim przypadku ruch środka masy można odseparować od pozostałych stopni swobody.

Separacja środka masy nie ogranicza się tylko do układów cząstek w pustej przestrzeni. Istnieją potencjały pułapkujące, dla których ruch środka masy jest niezależny od ruchu względnego. W najbardziej ogólnym przypadku, aby hamiltonian (4) miał tą własność, człony jednociałowe $\hat{H}_i$ muszą mieć formę kwadratową [61]:

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{\mathbf{p}}_i \cdot \widehat{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i}{2m_i} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i\right) + \frac{m_i}{2}\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \widehat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i + \text{człony liniowe} \tag{7}$$

gdzie tensory $\widehat{\alpha}$, $\widehat{\beta}$ i $\widehat{\gamma}$ są takie same dla każdej cząstki w układzie. Oznacza to, że atomy mogą znajdować się w potencjale harmonicznym tak długo jak ma on tą samą częstotliwość dla wszystkich cząstek. Możliwy jest też człon mieszany operatorów położenia i pędu, co oznacza, że atomy mogą liniowo zależeć od momentu pędu. Dodatkowo, hamiltonian układu może zawierać dowolną liniową kombinację operatorów położeń i pędów. Człon oddziałujący w (4) zależy tylko od położeń względnych, więc również może być dowolny. Dla takiej klasy układów, środek masy separuje się od reszty dynamiki i jest opisywany hamiltonianem:

$$\hat{H}_{\mathrm{CM}} = \frac{\hat{\mathbf{P}} \cdot \widehat{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{2M} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{R}} \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{P}} \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{R}}\right) + \frac{M}{2}\hat{\mathbf{R}} \cdot \widehat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{R}} + \text{człony liniowe} \tag{8}$$

Ponieważ jest to hamiltonian jednocząstkowy, jego rozwiązanie nie stanowi problemu. Problemem natomiast pozostaje analiza ruchu względnego.

Współrzędne ruchu względnego są z definicji niezależne od współrzędnych ruchu środka masy. Takimi operatorami są operatory względnych położeń postaci $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \hat{\mathbf{x}}_i - \hat{\mathbf{x}}_j$, jak również ich dowolne kombinacje liniowe. Jak można łatwo sprawdzić, każdy tak zdefiniowany operator jest przemienny z operatorem pędu środka masy. Z kolei aby pęd względny był niezależny od współrzędnych środka masy, musi być jakąś kombinacją liniową operatorów proporcjonalnych do względnych prędkości między cząstkami $\hat{\mathbf{q}}_{ij} = \mu_{ij}\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i}{m_i} - \frac{\hat{\mathbf{p}}_j}{m_j}\right)$, gdzie $\mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}$ to zredukowana masa. Tak zdefiniowane operatory $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ i $\hat{\mathbf{q}}_{ij}$ spełniają kanoniczną relację komutacji $[\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{q}}_{ij}] = i\hbar\hat{\mathbf{1}}$. Z drugiej strony operatory $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ oraz $\hat{\mathbf{q}}_{ik}$ dla $j \neq k$ nie są przemienne, co pokazuje, że nie wszystkie tak zdefiniowane współrzędne są od siebie niezależne. Istotnie, istnieje $\frac{N(N-1)}{2}$ takich par operatorów, ale w układzie $N$ cząstek występuje tylko $N-1$ niezależnych współrzędnych ruchu względnego. W szczególnym przypadku $N = 2$ cząstek, układ ma tylko jedną parę współrzędnych ruchu względnego, więc ten problem nie występuje. Wówczas hamiltonian ruchu względnego ma postać:

$$\hat{H}_{rel} = \frac{\hat{\mathbf{q}}_{12} \cdot \widehat{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{q}}_{12}}{2\mu_{12}} + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{q}}_{12} + \hat{\mathbf{q}}_{12} \cdot \widehat{\beta} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}\right) + \frac{\mu_{12}}{2}\hat{\mathbf{r}}_{12} \cdot \widehat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12} + \text{człony liniowe.} \tag{9}$$

Dla większej liczby cząstek, aby opisywać ruch względny należy skonstruować $N-1$ wzajemnie niezależnych współrzędnych i istnieje tutaj dość duża dowolność. Przykładem takich współrzędnych, często stosowanych do analizy układów kilku ciał, są współrzędne Jacobiego [62, 63, 64]. Jednak w ogólności to jakie współrzędne ruchu względnego najlepiej wybrać zależy od szczegółów analizowanego układu.

## 2.2 Transformacja Lee-Low-Pine

Szczególnym przypadkiem układu kilku ciał z poprzedniego podrozdziału jest mieszanina $N$ cząstek oddziałujących z pojedynczą niejednorodnością i znajdujących się w pustej przestrzeni. Hamiltonian takiego układu ma postać [65]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_0^2}{2m_0} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m_i} + \sum_{i=1}^{N} V_i\left(\hat{\mathbf{x}}_0 - \hat{\mathbf{x}}_i\right) \ . \tag{10}$$

Rzecz jasna w tym przypadku możliwa jest separacja środka masy. Dla współrzędnych ruchu względnego, naturalnym wyborem wydają się operatory położenia postaci $\hat{\mathbf{r}}_i = \hat{\mathbf{x}}_0 - \hat{\mathbf{x}}_i$, a więc względne odległości cząstek od niejednorodności. Jak łatwo można sprawdzić tworzą one komplet zmiennych niezależnych. W celu przekształcenia hamiltonianu do tych współrzędnych można posłużyć się transformacją Lee-Low-Pine (LLP), która po raz pierwszy została zastosowana w 1952 roku do analizy problemu elektronu w krysztale [66].

Transformacja LLP składa się z dwóch kroków. W pierwszym, na hamiltonian układu działa się transformacją skonstruowaną z użyciem operatora $\hat{S}$, postaci:

$$\hat{S} = \exp\left[-i\hat{\mathbf{x}}_0 \cdot \left(\sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{p}}_i - \hat{\mathbf{p}}_0\right)\right] \ . \tag{11}$$

Jest to operator unitarny, a więc skonstruowana z jego pomocą transformacja jest kanoniczna. W wyniku działania tej transformacji, operator pędu niejednorodności zostaje przekształcony do operatora pędu środka masy ($\hat{S}\hat{\mathbf{p}}_0\hat{S}^{-1} = \hat{\mathbf{P}}$). Z drugiej strony operator położenia niejednorodności jest przemienny z operatorem $\hat{S}$ i nie ulega zmianie. Odwrotnie jest w przypadku pozostałych cząstek: operatory pędu nie zmieniają się, natomiast operatory położeń zostają przekształcone do operatorów położeń względnych ($\hat{S}\hat{\mathbf{x}}_i\hat{S}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}_i$ dla $i \geq 1$). Jak widać z użyciem tej transformacji połowa współrzędnych zostaje przekształcona do współrzędnych środka masy i ruchu względnego, natomiast druga połowa pozostaje niezmieniona.

Działając transformacją na hamiltonian (10) otrzymuje się:

$$\hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_0^2}{2m_0} + \sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2\mu_i} + \sum_{i=1}^{N} V_i(\hat{\mathbf{x}}_i) - \sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_0\cdot\hat{\mathbf{p}}_i}{m_0} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_i\cdot\hat{\mathbf{p}}_j}{m_0} \tag{12}$$

gdzie $\mu_i = \frac{m_0 m_i}{m_0+m_i}$ to masy zredukowane dla poszczególnych cząstek. Pęd środka masy ($\hat{\mathbf{p}}_0$ po transformacji) nie separuje się w tym hamiltonianie, co jest zrozumiałe, ponieważ w tym wypadku nie opisuje on ruchu środka masy (położenie kanonicznie sprzężone z tym pędem opisuje położenie niejednorodności, nie zaś środka masy). Dodatkowo, w hamiltonianie pojawiły się nowe człony sprzęgające pędy poszczególnych cząstek ze sobą oraz z pędem środka masy. Samodzielnie, ta transformacja nie wydaje się upraszczać analizowanego zagadnienia.

W drugim kroku transformacji LLP należy zauważyć, że hamiltonian $\hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S}$ nie zależy od operatora położenia $\hat{\mathbf{x}}_0$. W związku z tym jest jawnie przemienny z operatorem $\hat{\mathbf{p}}_0$. Nie byłoby to prawdą, gdyby cząstki znajdowały się w potencjale pułapkującym. Oznacza to, że pęd środka masy jest stałą ruchu. Prowadząc obliczenia w bazie stanów własnych operatora pędu, operator $\hat{\mathbf{p}}_0$ zostaje zastąpiony przez jego wartości własne $\mathbf{p}_0$. Dzięki temu układ może być analizowany niezależnie dla każdej wartość pędu środka masy. W szczególności, w układzie odniesienia związanym z ruchem środka masy wartość tego pędu wynosi zero, co znacząco upraszcza hamiltonian:

$$\hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S} \to \sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2\mu_i} + \sum_{i=1}^{N} V_i(\hat{\mathbf{x}}_i) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_i\cdot\hat{\mathbf{p}}_j}{m_0} \tag{13}$$

Uzyskany hamiltonian opisuje ruch względny układu w oczekiwanych współrzędnych.

Powyższą transformację łatwo uogólnia się na przypadek układu z oddziaływaniami wewnątrzskładnikowymi, ponieważ operatory względnych położeń $\hat{\mathbf{x}}_i - \hat{\mathbf{x}}_j$ dla $i, j \leq 1$ są przemienne z operatorem $\hat{S}$. Co więcej, chociaż w powyższych rozważaniach cząstki są traktowane jako rozróżnialne, nic nie stoi na przeszkodzie by stosować tą transformację w przypadku bozonów [67] jak i fermionów [68]. Fundamentalnym ograniczeniem tej metody jest to, że można ją stosować wyłącznie do mieszanin w pustej przestrzeni (lub w potencjale jednorodnym). Jednocześnie, jak zostało pokazane w poprzednim podrozdziale, istnieją potencjały pułapkujące, dla których możliwa jest separacja środka masy. Rodzi to pytanie czy istnieje transformacja analogiczna do transformacji LLP, dająca analogiczne rezultaty dla dowolnego układu z separowalnym środkiem masy. Jak zostanie pokazane w następnym rozdziale, odpowiedź na to pytanie jest twierdząca.

## 2.3 Dwa atomy w potencjale harmonicznym

Nie często zdarza się, że realityczny model fizyczny ma analityczne rozwiązanie. Co gorsza wiele z nich opisuje bardzo specyficzne problemy, bez szerszego zastosowania. Istnieją jednak takie modele, których ścisłe rozwiązania stały się fundamentami współczesnej fizyki. Należą do nich chociażby model oscylatora harmonicznego, model cząstki w studni potencjału czy model atomu wodoru. Z ich pomocą można tworzyć przybliżone rozwiązania bardziej skomplikowany problemów fizycznych. W fizyce kilku ultrazimnych atomów takim fundamentalnym modelem jest układ dwóch cząstek oddziałujących kontaktowo w pułapce harmonicznej, rozwiązany w pracy [69]. W mojej rozprawie zostanie wykorzystana jego jednowymiarowa wersja, którą teraz krótko omówię.

W tym modelu, dwie cząstki o masach $m$ znajdują się w jednowymiarowej pułapce harmonicznej o częstości $\omega$. Między cząstkami występuje oddziaływanie kontaktowe o sile $g$ opisywane za pomocą delty Diraca. W naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego hamiltonian tego układu ma postać:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{x_1^2}{2} + \frac{x_2^2}{2} + g\delta(x_1 - x_2) \ . \tag{14}$$

$\big($jednostki energii, położenia i siły oddziaływań to odpowiednio $\hbar\omega$, $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ i $\sqrt{\hbar^3\omega/m}$ $\big)$. Zgodnie z podrozdziałem 2.1, ruch środka masy separuje się. Dla wygody współrzędne środka masy i położenia względnego są tu nieznacznie inaczej zdefiniowane, jako odpowiednio $R = (x_1 + x_2)/\sqrt{2}$ oraz $r = (x_1 - x_2)/\sqrt{2}$. Za sprawą separacji, hamiltonian dzieli się na dwa niezależne problemy jednocząstkowe:

$$\hat{H}_{\mathrm{CM}} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{R^2}{2} \ , \tag{15}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{rel}} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{r^2}{2} + \frac{g}{\sqrt{2}}\delta(r) \ . \tag{16}$$

Hamiltonian środka masy $\hat{H}_{\mathrm{CM}}$ opisuje problem oscylatora harmonicznego. W związku z tym jego energie i wektory własne to odpowiednio $E_m = m + 1/2$ i $\Psi_m(R) \propto e^{-R^2/2}\mathbb{H}_m(R)$, gdzie $\mathbb{H}_m()$ to wielomiany Hermite'a. Hamiltonian ruchu względnego $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ opisuje cząstkę w potencjale harmonicznym z dodatkowym potencjałem delty Diraca. Ponieważ całkowity potencjał jest symetryczny względem $r$, wektory własne dzielą się na parzyste i nieparzyste funkcje. Nieparzyste funkcje falowe zerują się w centrum pułapki, przez co są nieczułe na barierę potencjału w środku. W związku z tym rozwiązania nieparzyste są takie same jak dla zwykłego oscylatora harmonicznego. Przy rozwiązaniach parzystych środkowa ba-

riera może być traktowana jako warunek brzegowy łączący dwie połowy pułapki harmonicznej. Tak więc jest to ponownie oscylator harmoniczny, ale z nietypowymi warunkami brzegowymi. Bez straty ogólności funkcje falową ruchu względnego można zapisać w postaci $\psi_n(r) = u_n(r^2)e^{-r^2/2}$, gdzie $u_n()$ to nieznana funkcja. Używając tego podstawienia zagadnienie własne dla ruchu względnego przekształca się w konfluentne hipergeometryczne równanie różniczkowe [70]:

$$\xi \frac{\partial^2 u_n}{\partial \xi^2} + \left(\frac{1}{2} - \xi\right) \frac{\partial u_n}{\partial \xi} - \left(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_n}{2}\right) u_n = 0 \ , \tag{17}$$

gdzie $\epsilon_n$ to nieznane energie własne dla ruchu względnego. Oznacza to, że funkcja $u_n()$ jest jakąś kombinacją konfluentnych funkcji hipergeometrycznych pierwszego i drugiego rodzaju. Konfleuntna funkcja hipergeometryczna pierwszego rodzaju nie zanika w nieskończoności (nawet po przemnożeniu przez $e^{-x^2/2}$), a więc nie spełnia warunków brzegowych problemu. Oznacza to, że funkcje falowe ruchu względnego mają postać:

$$\psi_n(r) \propto e^{-x^2/2} U\left(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_n}{2}, \frac{1}{2}, r^2\right) \ , \tag{18}$$

gdzie $U()$ to konfluentna funkcja hipergeometryczna drugiego rodzaju.

Warunek na energie własne otrzymuje się poprzez uwzględnienie delty Diraca w środku pułapki:

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}r^2 + \frac{g}{\sqrt{2}}\delta(r) - \epsilon_n\right) \psi_n(r) dr = 0 \ . \tag{19}$$

To narzuca warunek brzegowy $\lim_{\epsilon \to 0^+} \psi_n'(\epsilon) = \frac{g}{\sqrt{2}}\psi_n(0)$. Korzystając z rozwinięcia w szereg Maclaurina konfluentnej funkcji hypergeometrycznej drugiego rodzaju otrzymujemy:

$$U\left(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_n}{2}, \frac{1}{2}, r^2\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{3}{4} - \frac{\epsilon_n}{2})} - 2|r|\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_n}{2})} + O(r^2) \ . \tag{20}$$

Tym samym warunek na energie własne ma postać:

$$2\sqrt{2}\ \Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{\epsilon_n}{2}\right) + g\ \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{\epsilon_n}{2}\right) = 0 \ . \tag{21}$$

Jest to równanie przestępne i dla parzystych funkcji falowych nie ma rozwiązań analitycznych. Niemniej jednak mogą one być łatwo znalezione numerycznie z dowolnie dużą dokładnością, np. korzystając z metody bisekcji.

# 3 Uogólnienie transformacji LLP

Przedstawiona w poprzednim rozdziale transformacja LLP może zostać użyta przy analizie problemu polaronu fermionowego w potencjale jednorodnym. Nie można jej jednak zastosować dla analogicznego układu w jednowymiarowej pułapce harmonicznej. Jednocześnie, jak zostało pokazane, układy cząstek w potencjale harmonicznym należą do klasy problemów, w których możliwa jest separacja środka masy. W ogólności powinno być więc możliwe przekształcenie tego problemu do takich samych współrzędnych jak w przypadku użycia transformacji LLP. Przez analogię można się spodziewać, że takie podejście pozwoliłoby na uproszczenie analizowanego problemu. Głównym wynikiem prezentowanym w niniejszej rozprawie jest uogólnienie transformacji LLP w taki sposób, aby mogła być ona stosowana do każdego układu, w którym możliwa jest separacja środka masy. Następnie ta transformacja zostaje użyta do analizy problemu polaronu fermionowego w pułapce harmonicznej.

## 3.1 Sformułowanie problemu

Pierwszym krokiem przy analizowaniu zagadnień fizycznych jest matematyczne sformułowanie problemu. Odpowiednio dobrany język opisu pozwala znacząco uprościć analizę. Przykładowo, hamiltonian rozpatrywanego przeze mnie układu (3) zawiera mnogość parametrów fizycznych (masa fermionów $m$, masa niejednorodności $M$, częstotliwość pułapki $\omega$, siła oddziaływań $g$ oraz liczba fermionów $N$) ważnych z punktu widzenia eksperymentów. Jednakże przy opisie matematycznym, część z tych parametrów można wyeliminować poprzez zamianę jednostek wielkości fizycznych. W szczególności w jednostkach naturalnych dla problemu oscylatora harmonicznego (jednostka energii $\hbar\omega$, jednostka czasu $1/\omega$, jednostka położenia $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ oraz jednostka siły oddziaływań $\sqrt{\hbar^3\omega/m}$) hamiltonian upraszcza się do postaci:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{My^2}{2} + \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{x_i^2}{2} + g\delta(x_i - y)\right] . \tag{22}$$

W tej sytuacji model ma tylko trzy parametry: stosunek masy między niejednorodnością a fermionami $M$, siłę oddziaływań międzycząstkowych $g$ oraz liczbę fermionów $N$.

Hamiltonian $\hat{H}$ został przedstawiony w reprezentacji położeniowej. W tak zwanym formalizmie pierwszej kwantyzacji stany układu są opisywane za pomocą funkcji falowych $\Psi(x_1, .., x_N; y)$ będących funkcjami położeń poszczególnych cząstek. To podejście jest użyteczne przy rozpatrywaniu mieszanin rozróżnialnych cząstek, ale staje się nieadekwatne przy analizie fermionowych gazów. W przypadku mieszanin fermionowych funkcja falowa powinna być bowiem antysymetryczna względem zamiany miejscami dwóch identycznych cząstek, co

w ogólności nie jest prawdą dla stanów własnych hamiltonianu (22). Odpowiednią symetrię można narzucić działając na funkcję falową operatorem antysymetryzującym:

$$\hat{\mathcal{A}}\Psi(x_1,..,x_N;y) = \frac{1}{N!}\sum_{\pi\in S_N}(-1)^{\pi}\Psi(\pi(x_1),..,\pi(x_N);y)\ , \tag{23}$$

gdzie suma przebiega po wszystkich permutacjach identycznych cząstek $S_N$. Jak widać liczba członów w takiej funkcji falowej rośnie kombinatorycznie z liczbą cząstek, co czyni ten zapis niepraktycznym, nawet w przypadku kilkuciałowym. Problem wynika z tego, że na poziomie opisu matematycznego cząstki są traktowane jak całkowicie rozróżnialne obiekty z niezależnymi współrzędnymi. Odpowiedzią na to jest tzw. formalizm drugiej kwantyzacji, w którym nacisk kładziony jest na to ile cząstek znajduje się w poszczególnych stanach kwantowych, bez ich rozróżniania. Do opisu stosuje się tak zwane operatory anihilacji i kreacji ($\hat{a}_m$ oraz $\hat{a}_m^\dagger$), które odpowiednio usuwają i dodają cząstkę do danego jednocząstkowego stanu kwantowego $|m\rangle$. Wektory stanów kwantowych w reprezentacji liczby obsadzeń buduje się poprzez działanie operatorami kreacji na stan bez żadnych cząstek (tak zwany stan próżni $|0\rangle$). Wektory bazowe, zwane stanami Focka, są postaci:

$$|l_1,l_2,...,l_k,...\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{l_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{l_2}...(\hat{a}_k^\dagger)^{l_k}...\,|0\rangle\ \ , \tag{24}$$

gdzie $l_i$ to liczba cząstek w $i$-tym stanie kwantowym w wybranej bazie stanów jednocząstkowych. Ten formalizm może być stosowany dla obu typów nierozróżnialnych cząstek. W przypadku fermionów, operatory kreacji i anihilacji są powiązane ze sobą regułami antyprzemienności $\left\{\hat{a}_m,\hat{a}_{m'}^\dagger\right\} = \delta_{m,m'}$ oraz $\left\{\hat{a}_m,\hat{a}_{m'}\right\} = \left\{\hat{a}_m^\dagger,\hat{a}_{m'}^\dagger\right\} = 0$, gdzie $\delta_{m,m'}$ to delta Kroneckera. Dzięki tym relacjom, wektory stanów kwantowych utworzone za pomocą operatorów kreacji automatycznie zachowują statystykę fermionową. W związku z tym w każdym stanie kwantowym może być co najwyżej jedna cząstka $l_i \in \{0,1\}$. W przypadku mieszanin wieloskładnikowych każdy składnik powinien mieć swoje własne operatory kreujące i anihilujące cząstki. Wówczas wektory bazowe dla całego układu są iloczynami tensorowymi wektorów bazowych dla poszczególnych składników.

Operatory kreacji i anihilacji można sformułować dla dowolnej bazy stanów jednocząstkowych. Szczególnym przypadkiem są tak zwane operatory pola $\hat{\psi}^\dagger(x)$ oraz $\hat{\psi}(x)$, zdefiniowane dla bazy położeniowej $|x\rangle$, a więc tworzące i usuwające cząstki w danym punkcie przestrzeni $x$. W ich wypadku reguła antyprzemienności ma postać $\left\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^\dagger(x')\right\} = \delta(x-x')$. Operatory pola można rozłożyć na operatory kreacji i anihilacji w dowolnej dyskretnej bazie jednociałowej $\{|n\rangle\}$ według przepisu $\hat{\psi}(x) = \sum_n \langle x|n\rangle\,\hat{a}_n$ i vice versa $\hat{a}_n = \int dx\,\langle n|x\rangle\,\hat{\psi}(x)$.

Użyteczność operatorów pola uwidacznia się przy opisie hamiltonianu z użyciem dru-

giej kwantyzacji. Analizowany hamiltonian składa się z operatorów energii kinetycznej, potencjału pułapkującego oraz oddziaływań międzycząstkowych. Pierwsze dwa są przykładami operatorów jednocząstkowych. Dowolny operator jednocząstkowy $\hat{O}_1$ w języku drugiej kwantyzacji ma postać $\hat{\mathcal{O}}_1 = \int dx \int dx' \langle x| \hat{O}_1 |x'\rangle \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x')$ (dla operatorów kreacji i anihilacji zdefiniowanych w dyskretnych bazach całki zostałyby zastąpione przez sumy). W przypadku operatora energii kinetycznej $\hat{T}$ wyrażenie $\langle x| \hat{T} |x'\rangle$ jest proporcjonalne do $\partial_x^2 \delta(x - x')$. Obecna w nim delta Diraca trywializuje jedną z całek przy zapisie operatora w drugiej kwantyzacji. Analogicznie jest dla dowolnego operatora potencjału $\hat{U}$, ponieważ $\langle x| \hat{U} |x'\rangle = U(x)\delta(x - x')$. Operator oddziaływań międzycząstkowych $\hat{V}$ jest operatorem dwucząstkowym i w związku z tym ma bardziej skomplikowaną formę:

$$\hat{\mathcal{V}} = \int dx \int dx' \int dy \int dy' \, \langle xy| \hat{V} |x'y'\rangle \, \hat{\psi}_A^\dagger(x)\hat{\psi}_B^\dagger(y)\hat{\psi}_B(y')\hat{\psi}_A(x') \; , \tag{25}$$

gdzie $\hat{\psi}_A(x)$ i $\hat{\psi}_B(x)$ to operatory pola dla poszczególnych składników. To wyrażenie również upraszcza się ponieważ $\langle xy| \hat{V} |x'y'\rangle = V(x, y)\delta(x - x')\delta(y - y')$. Dla oddziaływań kontaktowych dodatkowo zachodzi $V(x, y) = g\delta(x - y)$. Podsumowując, analizowany hamiltonian w formalizmie drugiej kwantyzacji ma postać:

$$\begin{aligned} \hat{H} = &\sum_{\sigma=A,B} \int dx \; \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x) \left[ -\frac{1}{2m_\sigma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m_\sigma}{2} x^2 \right] \hat{\psi}_\sigma(x) \\ &+ g \int dx \; \hat{\psi}_A^\dagger(x)\hat{\psi}_B^\dagger(x)\hat{\psi}_B(x)\hat{\psi}_A(x) \; . \end{aligned} \tag{26}$$

Suma przebiega po dwóch składnikach mieszaniny, a masa $m_\sigma$ to 1 i $M$ odpowiednio dla fermionów i niejednorodności.

W pierwszej kwantyzacji, przestrzeń stanów kwantowych dla mieszaniny $N + 1$ cząstek jest opisywana za pomocą ($N$+1)-krotnego iloczynu tensorowego $\mathcal{H}_A^N \otimes \mathcal{H}_B$, gdzie $\mathcal{H}_A$ i $\mathcal{H}_B$ to jednocząstkowe przestrzenie Hilberta dla poszczególnych składników. W reprezentacji położeniowej dla problemu jednowymiarowego powyższe jednocząstkowe przestrzenie Hilberta są reprezentowane jako przestrzenie funkcji jednej zmiennej, które są całkowalne w kwadracie: $L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \right\}$. Operatory kreacji i anihilacji zmieniają liczbę cząstek w układzie, więc jasnym jest, że nie są operatorami działającymi w ($N$+1)-cząstkowej przestrzeni Hilberta. W drugiej kwantyzacji operatory działają na tak zwaną przestrzeń Focka, która jest sumą prostą wszystkich $N$-cząstkowych przestrzeni Hilberta $\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^N$. W ogólności pozwala to analizować układy, w których liczba cząstek nie jest zachowana. Jednakże, jak można łatwo sprawdzić, hamiltonian (26) jest przemienny z operatorami liczby cząstek $\hat{N}_\sigma = \int dx \hat{\psi}_\sigma^\dagger(x)\hat{\psi}_\sigma(x)$. Oznacza to, że wektory

stanów odpowiadające różnej liczbie cząstek mogą być analizowane niezależnie. Niemniej, informacja o tym ile jest cząstek w poszczególnych składnikach mieszaniny nie jest zakodowana w hamiltonianie. Przy analizie mieszaniny z pojedynczą niejednorodnością jest to poważne utrudnienie. Układ z jedną niejednorodnością jest przypadkiem szczególnym - część przybliżeń i przekształceń analitycznych możliwych dla takiego układu nie działałaby w przypadku dwóch lub więcej niejednorodności. Przykładem tego będzie transformacja separująca środek masy prezentowana w następnym podrozdziale. Takich przekształceń nie można użyć bezpośrednio na hamiltonianie w drugiej kwantyzacji. Wpierw należałoby uwzględnić liczbę cząstek w formie więzów, co komplikowałoby cały proces. W pierwszej kwantyzacji nie ma takiego problemu.

### 3.1.1 Mieszana kwantyzacja

Zarówno pierwsza jak i druga kwantyzacja ma swoje zalety przy analizie problemu polaronu fermionowego. Dla fermionów tworzących morze Fermiego lepiej sprawdza się język drugiej kwantyzacji ponieważ pozwala łatwo uwzględnić ich kwantową statystykę. Z drugiej strony, dla niejednorodności lepsza jest pierwsza kwantyzacja, ponieważ wówczas informacja o liczbie cząstek jest zakodowana w hamiltonianie. Rodzi to pomysł, żeby połączyć te dwa formalizmy i stworzyć swego rodzaju mieszany formalizm, który łączyłby zalety obu z nich. Takie podejście zostało zastosowane wcześniej w pracy [67] dla polaronu bozonowego. W tym formalizmie stan kwantowy niejednorodności jest opisywany za pomocą jednocząstkowych funkcji bazowych w reprezentacji położeniowej $\{\Phi_n(y)\}$. Wektory stanów dla fermionów są natomiast przedstawiane w reprezentacji liczby obsadzeń $|l_1, l_2, ...\rangle$. Wektory stanów całego układu są zatem superpozycjami iloczynów tensorowych wektorów z obu powyższych podprzestrzeni $\sum_{nk} A_{nk}\Phi_n(y) \otimes |l_1, l_2, ...\rangle_k$, gdzie indeks $k$ numeruje kolejne wektory w bazie liczby obsadzeń. Te stany są elementami przestrzeni Hilberta będącej iloczynem tensorowym przestrzeni funkcji całkowalnych w kwadracie oraz przestrzeni Focka: $L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}(\mathcal{H})$. Operatory działające w tej przestrzeń będą zapisywane w postaci $\hat{O}[y, \partial_y]$. Operatory działające wyłącznie w podprzestrzeniach $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ i $L^2(\mathbb{R})$ będą zapisywane odpowiednio jako $\hat{O}$ oraz $O[y, \partial_y]$. Jeżeli operator działający w podprzestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ jest funkcją zmiennej $y$ (nie zawiera pochodnych $\partial_y$) będzie to uwzględnione w zapisie (odpowiednio $\hat{O}[y]$ oraz $O[y]$). Ponieważ operatorem identyczności w podprzestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ jest funkcja stała $\mathbb{1}[y] = 1$, ten symbol będzie pomijany w sytuacji gdy jest to oczywiste.

Aby analizować układ w tym formalizmie, należy w nim przede wszystkim zapisać hamiltonian. W przypadku części nieoddziałującej nie jest to problemem. Operatory energii kinetycznej i potencjału pułapkującego dla niejednorodności działają w podprzestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ identycznie jak w języku pierwszej kwantyzacji (22). W podprzestrzeni $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ działają na-

tomiast operatorem identyczności $\hat{\mathbb{1}}$. Dla fermionów operatory części nieoddziałującej są opisywane tak samo jak w formalizmie drugiej kwantyzacji (26), natomiast w przestrzeni funkcji zmiennej $y$ działają jak funkcja stała. Człon hamiltonianu opisujący oddziaływania międzyskładnikowe działa nietrywialnie w obu podprzestrzeniach. Jednakże, jak można wprost pokazać, elementy macierzowe dowolnego operatora oddziaływań międzyskładnikowych $\hat{\mathcal{V}} = \int dx \int dy\ \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\phi}^\dagger(y)V(x,y)\hat{\phi}(y)\hat{\psi}(x)$, w bazie położeniowej dla pojedynczej niejednorodności $|y\rangle = \hat{\phi}^\dagger(y)\,|0\rangle$ jest równy:

$$\langle y|\,\hat{\mathcal{V}}\,|y'\rangle = \int dx\ \hat{\psi}^\dagger(x)V(x,y)\hat{\psi}(x)\delta(y-y') =: \hat{V}[y]\delta(y-y')\ , \tag{27}$$

co jest reprezentacją tego operatora w proponowanym formalizmie. Całościowo, hamiltonian układu w tym formalizmie ma zatem postać:

$$\hat{\mathcal{H}}\,[y,\partial_y] = \left(-\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{M}{2}y^2\right)\hat{\mathbb{1}} + \int dx\ \hat{\psi}^\dagger(x)\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2 + g\delta(x-y)\right]\hat{\psi}(x)\ , \tag{28}$$

co jest punktem wyjścia do dalszej analizy.

## 3.2 Transformacja współrzędnych

Pierwszym krokiem przy rozwiązywaniu rozważanego zagadnienia będzie zmniejszenie liczby występujących w nim stopni swobody. Jak pokazałem w podrozdziale 2.1, dla mieszaniny w pułapce harmonicznej możliwa jest separacja środka masy. Współrzędne ruchu względnego po separacji mogą być zdefiniowane na wiele różnych sposobów i nie w każdym przypadku są one wzajemnie niezależne. W analizowanym problemie polaronu fermionowego, międzycząstkowe oddziaływania występują wyłącznie miedzy składnikami (nie ma oddziaływań wewnątrzskładnikowych). W związku z tym dobrym kandydatem na współrzędne ruchu względnego są odległości między fermionami a niejednorodnością. W ogólności, dla mieszaniny $N+M$ cząstek, byłoby $NM$ takich współrzędnych. Ponieważ jednak w rozważanym układzie jest tylko jedna niejednorodność, w tym wypadku mamy do czynienia z $N$ współrzędnymi. Oznacza to łącznie $N+1$ współrzędnych ruchu środka masy oraz ruchu względnego - tyle samo co początkowa liczba stopni swobody. Co więcej, jak łatwo można sprawdzić, są one wzajemnie niezależne. Opis układu w takich współrzędnych nie jest nowym pomysłem. W istocie, są to takie same współrzędne jakie uzyskuje się w wyniku transformacji LLP dla problemu polaronu w jednorodnym potencjale (podrozdział 2.2).

W reprezentacji położeniowej, w języku pierwszej kwantyzacji, proponowane współrzędne

środka masy i ruchu względnego mają postać:

$$R = \frac{1}{N+M}\left(\sum_{j=1}^{N} x_j + My\right) \tag{29a}$$

$$r_j = x_j - y\ . \tag{29b}$$

Odpowiadające im operatory pędów to odpowiednio $\hat{P}_R = \sum_j \hat{p}_j + \hat{q}$ oraz $\hat{P}_j = \hat{p}_j - \frac{m_j}{M}\hat{P}_R$, gdzie w reprezentacji położeniowej $\hat{p}_j = -i\partial_{x_j}$ i $\hat{q} = -i\partial_y$. Jasnym jest, że tak zdefiniowane współrzędne ruchu względnego są niezależne od współrzędnych środka masy. Co ważne, operatory pędu dla ruchu względnego nie są proporcjonalne do względnych prędkości między fermionami a niejednorodnością, ale do względnych prędkości między fermionami a środkiem masy (co jest kombinacją liniową powyższych). Operatory pędu muszą być w ten sposób zdefiniowane, aby reguła przemienności $\left[\hat{r}_j, \hat{P}_k\right] = i\delta_{jk}$ zachodziła również dla $j \neq k$, a więc aby współrzędne ruchu względnego były wzajemnie niezależne. W formalizmie drugiej kwantyzacji operatory położenia i pędu są opisywane z użyciem operatorów pola: $\hat{x} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) x \hat{\psi}(x)$ oraz $\hat{p} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x)(-i\partial_x)\hat{\psi}(x)$. Reguła przemienności dla nich ma postać $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hat{N}$, gdzie $\hat{N} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$ to operator liczby cząstek. Zgodnie z poprzednim podrozdziałem, układ analizowany jest w formalizmie mieszającym pierwszą i drugą kwantyzację. W związku z tym operatory położeń i pędów działają w przestrzeni $L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}(\mathcal{H})$. W analogii do równań (29), nowe zmienne są definiowane jako:

$$\hat{R}[y] = \frac{1}{N+M}\left(\hat{x} + My\hat{\mathbb{1}}\right) \tag{30a}$$

$$\hat{r}[y] = \hat{x} - \hat{N}y \tag{30b}$$

Jak widać definicja współrzędnych względnych $\hat{r}[y]$ różni się od jej odpowiednika w formalizmie pierwszej kwantyzacji o operator liczby cząstek $\hat{N}$. Jest to konieczne, aby relacje komutacji nowych zmiennych były zachowane.

Jeżeli te zmienne zachowują kanoniczne relacje komutacji, powinna istnieć transformacja kanoniczna między starymi i nowymi zmiennymi. Innymi słowy powinien istnieć operator $\hat{S}[y, \partial_y]$, taki że $\hat{R}[y] = \hat{S}[y, \partial_y] y\hat{\mathbb{1}} \hat{S}^{-1}[y, \partial_y]$ oraz $\hat{r}[y] = \hat{S}[y, \partial_y]\hat{x}\hat{S}^{-1}[y, \partial_y]$. Postuluję, że ten operator ma postać:

$$\hat{S}[y, \partial_y] = \hat{S}_1[y] \cdot \hat{S}_2[\partial_y] = \exp\left(-iy\hat{p}\right) \exp\left(\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}\right)\ . \tag{31}$$

Jak widać operator $\hat{S}[y, \partial_y]$ działa nietrywialnie zarówno na przestrzeń Focka, jak i na przestrzeń funkcji zmiennej $y$. Jest on iloczynem dwóch operatorów wykładniczych, nazwanych

$\hat{S}_1[y]$ oraz $\hat{S}_2[\partial_y]$. Dla obu tych operatorów argumentem funkcji wykładniczej jest operator antyhermitowski, a więc są to operatory unitarne. Oznacza to, że ich iloczyn $\hat{S}[y, \partial_y]$ również jest operatorem unitarnym. W związku z tym łatwo otrzymuje się operator odwrotny:

$$\hat{S}^{-1}[y, \partial_y] = \hat{S}_2^{-1}[\partial_y] \cdot \hat{S}_1^{-1}[y] = \exp\left(-\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}\right) \exp\left(iy\hat{p}\right) \ . \tag{32}$$

W celu sprawdzenia poprawności postulowanej transformacji należy zadziałać nią na współrzędne $y\hat{\mathbb{1}}$ oraz $\hat{x}$. Przy obliczeniach przydatny będzie wzór Bakera-Campbella-Hausdorffa [71], zgodnie z którym dla dowolnych operatorów $A$ i $B$ zachodzi:

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2}[A, [A, B]] + ... + \frac{1}{n!}[A, [A, ...[A, B]...]] + ... \tag{33}$$

Zaczynając od operatora zmiennej położenia niejednorodności, transformację można dokonać w dwóch krokach. Najpierw dokonujemy transformacji operatora $y\hat{\mathbb{1}}$ za pomocą $\hat{S}_2[\partial_y]$:

$$\begin{aligned} &\hat{S}_2[\partial_y] y\hat{\mathbb{1}} \hat{S}_2^{-1}[\partial_y] = \exp\left(\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}\right) y\hat{\mathbb{1}} \exp\left(-\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}\right) = \\ &= y\hat{\mathbb{1}} + [\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}, y\hat{\mathbb{1}}] + \frac{1}{2}[\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}, [\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}, y\hat{\mathbb{1}}]] + ... = y\hat{\mathbb{1}} + \frac{\hat{x}}{M+N} \end{aligned} \tag{34}$$

W następnym kroku analogiczną transformację wykonuje się z użyciem operatora $\hat{S}_1[y]$. Człon $y\hat{\mathbb{1}}$ komutuje z tym operatorem, więc ta transformacja działa nietrywialnie tylko na drugi człon:

$$\begin{aligned} &\hat{S}_1[y] \left(\hat{\mathbb{1}} + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) \hat{S}_1^{-1}[y] = y\hat{\mathbb{1}} + \exp\left(-iy\hat{p}\right) \frac{\hat{x}}{M+N} \exp\left(iy\hat{p}\right) = \\ &= y\hat{\mathbb{1}} + \frac{\hat{x}}{M+N} + [-iy\hat{p}, \frac{\hat{x}}{M+N}] = y\hat{\mathbb{1}} + \frac{\hat{x}}{M+N} - \frac{y\hat{N}}{M+N} = \hat{R}[y] \end{aligned} \tag{35}$$

Ostatnia równość jest prawdziwa tylko dla stanów będących stanami własnymi operatora liczby cząstek $\hat{N}$, ponieważ w tej podprzestrzeni zachodzi $\hat{N} = N\hat{\mathbb{1}}$. Analogicznie, można dokonać transformacji operatora $\hat{x}$ za pomocą $\hat{S}[y, \partial_y]$. W tym wypadku pierwszy krok jest trywialny, ponieważ operator $\hat{x}$ jest przemienny z $\hat{S}_2[\partial_y]$. W drugim kroku otrzymuje się:

$$\hat{S}_1[y] \hat{x} \hat{S}_1^{-1}[y] = \exp\left(-iy\hat{p}\right) \hat{x} \exp\left(iy\hat{p}\right) = \hat{x} + [-iy\hat{p}, \hat{x}] = \hat{r}[y] \tag{36}$$

Pokazuje to, że postulowana transformacja z użyciem operatora unitarnego $\hat{S}[y, \partial_y]$ w istocie prowadzi do oczekiwanej zamiany zmiennych.

## 3.3 Transformacja hamiltonianu

Z pomocą operatora $\hat{S}[y, \partial_y]$, zapisanie hamiltonianu we współrzędnych środka masy i ruchu względnego, sprowadza się do przeprowadzenia transformacji $\hat{S}^{-1}[y, \partial_y]\hat{H}[y, \partial_y]\hat{S}[y, \partial_y]$. Obliczenie tego wyrażenia jest złożonym zadaniem, które dobrze zacząć od przeanalizowania jak taka transformacja przekształca poszczególne operatory pola występujące w hamiltonianie (28). W analizie wykorzystane zostaną relacje przemienności $[\hat{p}, \hat{\psi}(x)] = i\partial_x\hat{\psi}(x)$ oraz $[\hat{x}, \hat{\psi}(x)] = -x\hat{\psi}(x)$. Dla operatora anihilacji $\hat{\psi}(x)$, pierwsza część transformacji ma postać:

$$\begin{aligned}\hat{S}_1^{-1}[y]\hat{\psi}(x)\hat{S}_1[y] &= \hat{\psi}(x) + [iy\hat{p}, \hat{\psi}(x)] + \frac{1}{2}[iy\hat{p}, [iy\hat{p}, \hat{\psi}(x)]] + ... = \\ &= \hat{\psi}(x) - y\partial_x\hat{\psi}(x) + \frac{(-y\partial_x)^2}{2}\hat{\psi}(x) + ... = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-y\partial_x)^n}{n!}\hat{\psi}(x) = \hat{\psi}(x-y)\end{aligned} \tag{37}$$

Aby uzyskać analogiczny wynik dla operatora kreacji $\hat{\psi}^\dagger(x)$ wystarczy zastosować sprzężenie hermitowskie dla obu stron powyższego równania: $\hat{S}_1^{-1}[y]\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{S}_1[y] = \hat{\psi}^\dagger(x-y)$. Dokończenie tej transformacji poprzez obliczenie $\hat{S}_2^{-1}[\partial_y]\hat{\psi}(x-y)\hat{S}_2[\partial_y]$ jest niestety znacznie bardziej skomplikowane, ponieważ operator $\hat{S}_2[\partial_y]$ działa nietrywialnie zarówno na sam operator pola jak i na zmienną $y$. Na szczęście istnieje dodatkowa matematyczna własność hamiltonianu, która pozwala uniknąć obliczania tej wielkości. W hamiltonianie (28) operatory pola znajdują się bowiem zawsze pod całkami z przedziałami od $-\infty$ do $+\infty$. Oznacza to, że po zastosowaniu transformacji $\hat{S}_1^{-1}[y]\hat{H}\hat{S}_1[y]$ można dokonać przesunięcia zmiennych całkowania o $y$ bez wpływu na granice całkowania. Dzięki temu operatory postaci $\hat{\psi}(x-y)$ oraz $\hat{\psi}^\dagger(x-y)$ zostaną zastąpione odpowiednio przez $\hat{\psi}(x)$ oraz $\hat{\psi}^\dagger(x)$, dla których można obliczyć drugą część transformacji:

$$\begin{aligned}\hat{S}_2^{-1}[\partial_y]\hat{\psi}(x)\hat{S}_2[\partial_y] &= \hat{\psi}(x) + \left[\frac{-\hat{x}\partial_y}{M+N}, \hat{\psi}(x)\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{-\hat{x}\partial_y}{M+N}, \left[\frac{-\hat{x}\partial_y}{M+N}, \hat{\psi}(x)\right]\right] + ... = \\ &= \hat{\psi}(x) + \frac{x\partial_y}{M+N}\hat{\psi}(x) + \frac{1}{2}\left(\frac{x\partial_y}{M+N}\right)^2\hat{\psi}(x) + ... = \exp\left(\frac{x\partial_y}{M+N}\right)\hat{\psi}(x)\end{aligned} \tag{38}$$

Sprzężenie hermitowskie tej wielkości jest równe $\hat{S}_2^{-1}[\partial_y]\hat{\psi}^\dagger(x)\hat{S}_2[\partial_y] = \exp\left(\frac{x\partial_y}{M+N}\right)\hat{\psi}^\dagger(x)$. Korzystając z powyższych wzorów można wprost przeprowadzić transformację hamiltonianu (28), choć wciąż jest to żmudne zadanie, ze względu na dużą liczę członów. Uzyskany w wyniku tej transformacji hamiltonian separuje się na dwie części, z których każda działa nietrywialnie tylko na jedną z podprzestrzeni:

$$\hat{S}^{-1}[y, \partial_y]\hat{H}[y, \partial_y]\hat{S}[y, \partial_y] = H_{CM}[y, \partial_y]\hat{\mathbb{1}} + \hat{H}_{rel}\ . \tag{39}$$

Są to odpowiednio hamiltonian $H_{CM}[y, \partial_y]$ opisujący ruch środka masy w reprezentacji położeniowej oraz hamiltonian $\hat{H}_{rel}$ opisujący ruch względny w reprezentacji liczby obsadzeń.

Zgodnie z przewidywaniami, część hamiltonianu odpowiadająca za ruch środka masy opisuje problem oscylatora harmonicznego:

$$H_{CM}[y, \partial_y] = -\frac{1}{2(M+N)}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{M+N}{2}y^2 \ . \tag{40}$$

W związku z tym stany własne ruchu środka masy są opisywane przez funkcje:

$$\Phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{M+N}{\pi}\right)^{1/4} \mathbb{H}_n(\sqrt{M+N}y)\exp\left(-\frac{(M+N)y^2}{2}\right) \tag{41}$$

gdzie $\mathbb{H}_n()$ to wielomiany Hermite'a. Energie tych stanów to odpowiednio $E_n = n + \frac{1}{2}$. Część hamiltonianu odpowiadająca za ruch względny jest bardziej skomplikowana:

$$\hat{H}_{rel} = \int dx\ \hat{\psi}^\dagger(x)h(x)\hat{\psi}(x) + \int dx \int dx'\ \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}^\dagger(x')V(x,x')\hat{\psi}(x')\hat{\psi}(x) \tag{42a}$$

$$h(x) = -\frac{1}{2}\frac{M+1}{M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\frac{M+N-1}{M+N}x^2 + g\delta(x) \tag{42b}$$

$$V(x,x') = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x \partial x'} - \frac{1}{2(M+N)}xx' \tag{42c}$$

Jak widać, ten hamiltonian opisuje jednoskładnikową mieszaninę oddziałujących fermionów. Człon pierwszy $h(x)$ opisuje ruch cząstki w potencjale harmonicznym z dodatkowym potencjałem delty Diraca w centrum pułapki. Z dokładnością do współczynników, $h(x)$ jest równoważne z hamiltonianem ruchu względnego w problemie dwóch cząstek (16) opisywanym w podrozdziale 2.3:

$$h(x) = \nu\left(-\frac{1}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\mu}{2}x^2 + \frac{g}{\nu}\delta(x)\right) \ , \tag{43}$$

gdzie $\mu = \sqrt{\frac{M(M+N-1)}{(M+1)(M+N)}}$ oraz $\nu = \sqrt{\frac{(M+1)(M+N-1)}{M(M+N)}}$. W związku z tym stany nieoddziałujące mają rozwiązanie analityczne. Są opisywane za pomocą wyznacznika Slatera stanów jednocząstkowych $\phi_m(x)$. Stany jednocząstkowe dzielą się na stany parzyste:

$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2^m m!}}\left(\frac{\mu}{\pi}\right) H_n(\sqrt{\mu}y)\exp\left(-\frac{\mu x^2}{2}\right) \tag{44}$$

z energiami własnymi $\epsilon_m = \nu(m + \frac{1}{2})$ oraz stany nieparzyste

$$\phi_m(x) \propto U\left(\frac{1-2\epsilon_m}{4}, \frac{1}{2}, \mu x^2\right) \exp\left(-\frac{\mu x^2}{2}\right) \tag{45}$$

w których energie własne są kolejnymi rozwiązaniami równania przestępnego:

$$\frac{\Gamma\left(\frac{3-2\epsilon_m/\nu}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1-2\epsilon_m/\nu}{4}\right)} = -\frac{\sqrt{\mu}g}{2\nu} \ . \tag{46}$$

Druga część hamiltonianu (42c) opisuje efektywne oddziaływania między fermionami. Jak widać, oddziaływania $V(x, x')$ zależą zarówno od położeń jak i pędów cząstek. Co bardziej istotne, są one odwrotnie proporcjonalne do stosunku mas $M$. Oznacza to, że jeżeli w oryginalnym problemie niejednorodność jest cięższa od fermionów ($M > 1$), wówczas hamiltonian ruchu względnego opisuje układ słabooddziałujacy. Jest tak niezależnie od tego jak silne jest faktyczne oddziaływanie międzyskładnikowe. Po transformacji bowiem człon opisujacy to oddziaływanie zachowuje się jak dodatkowy potencjał pułapkujący i został włączony do części nieoddziałującej. Oznacza to, że po wykonaniu proponowanej transformacji problem upraszcza się nie tylko dlatego, że jeden stopień swobody został odseparowany. W przypadku ciężkiej niejednorodności problem sprowadza się do znalezienia rozwiązania dla problemu słabo oddziałującego, co jest istotnie łatwiejsze niż w przypadku układów silnie oddziałujących.

# 4 Analiza numeryczna

## 4.1 Ścisła diagonalizacja

Przedstawiona w poprzednim rozdziale metoda pozwala uprościć pewne problemy fizyczne poprzez odseparowanie dynamiki ruchu środka masy. Niemniej, poza szczególnymi przypadkami (np. gdy masa niejednorodności w hamiltonianie (13) dąży do nieskończoności) dalsza separacja zmiennych nie jest możliwa i nie istnieją rozwiązania analityczne. Oznacza to, że konieczne jest zastosowanie metod numerycznych. W mojej rozprawie wykorzystuję w tym celu metodę ścisłej diagonalizacji [72, 73]. Pozwala ona znaleźć energie i wektory własne hamiltonianu zarówno dla stanu podstawowego jak i dla niskoenergetycznych stanów wzbudzonych. Tę metodę powszechnie stosuje się przy analizowaniu kilkuciałowych ultrazimnych mieszanin [74, 75, 76, 77, 78], ponieważ jest numerycznie ścisła, a więc w zasadzie umożliwia prowadzenie obliczeń z dowolnie dużą dokładnością. Wadą tej metody jest duże zużycie zasobów obliczeniowych, które jest tym większe im silniejsze są międzycząstkowe oddziaływania.

Metoda ścisłej diagonalizacji może być stosowana do szerokiej klasy zagadnień fizycznych jednak na potrzeby tej rozprawy przedstawię ją dla kilkuskładnikowej mieszaniny oddziałujących fermionów:

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_{\sigma} \int dx\ \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(x) h_{\sigma}(x) \hat{\psi}_{\sigma}(x) \\ &+ \sum_{\sigma\sigma'} \int dx \int dx'\ \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(x) \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(x') V_{\sigma\sigma'}(x,x') \hat{\psi}_{\sigma'}(x') \hat{\psi}_{\sigma}(x)\ .\end{aligned} \tag{47}$$

Zarówno hamiltonian analizowanego układu w języku drugiej kwantyzacji (26) jak i hamiltonian ruchu względnego po zastosowaniu uogólnionej transformacji LLP (42) są szczególnymi przykładami powyższego hamiltonianu.

Pierwszym krokiem przy rozwiązaniu problemu z użyciem metody ścisłej diagonalizacji jest przedstawienie hamiltonianu w postaci macierzowej. W tym celu definiuje się bazę wielocząstkową. Dogodnym wyborem jest baza stanów nieoddziałujących, w której wielociałowe stany bazowe są zbudowane ze stanów własnych $\phi_{m,\sigma}(x)$ hamiltonianu jednocząstkowego $h_{\sigma}(x)$ z uwzględnieniem statystyki identycznych cząstek. W języku drugiej kwantyzacji te stany tworzy się działając operatorami kreacji na stan próżni $|0\rangle$. W mieszaninie wieloskładnikowej każdy składnik ma swoje własne operatory kreacji ($\hat{a}^{\dagger}_{m}$ dla $\sigma = A$, $\hat{b}^{\dagger}_{l}$ dla $\sigma = B$, itd.). W związku z tym wektory bazowe mają postać:

$$|\Psi\rangle = \left(\hat{a}^{\dagger}_{m_1}\hat{a}^{\dagger}_{m_2}\cdot\ldots\cdot\hat{a}^{\dagger}_{m_{N_A}}\right)\left(\hat{b}^{\dagger}_{l_1}\hat{b}^{\dagger}_{l_2}\cdot\ldots\cdot\hat{b}^{\dagger}_{l_{N_B}}\right)\ldots|0\rangle\ . \tag{48}$$

W przypadku fermionów w każdym stanie może znajdować się co najwyżej jedna cząstka, a więc operatory kreacji w równaniu (48) nie powtarzają się. Aby zachować konsekwentnie znak stanu (reguły antyprzemienności) należy trzymać zawsze taką samą kolejność operatorów (np. rosnąco z rosnącym indeksem).

W celu rozpisania hamiltonianu $\hat{H}$ w tak zdefiniowanej bazie, wystarczy rozłożyć występujące w nim operatory pola $\hat{\psi}_\sigma(x)$ oraz $\hat{\psi}^\dagger_\sigma(x)$ na powyższe operatory kreacji i anihilacji (odpowiednio $\hat{\psi}_A(x) = \sum_m^\infty \phi_{m,A}(x)\hat{a}_m$ oraz $\hat{\psi}^\dagger_A(x) = \sum_m^\infty \phi^*_{m,A}(x)\hat{a}^\dagger_m$ i analogicznie dla pozostałych składników). W przypadku hamiltonianu ruchu względnego $\hat{H}_{rel}$ (42) ma się do czynienia z jednoskładnikowym układem oddziałujących fermionów, więc postać macierzowa wygląda następująco:

$$\hat{H} = \sum_m^\infty \epsilon^A_m \hat{a}^\dagger_m \hat{a}_m + \sum_{ijkl}^\infty V^{AA}_{ijkl} \hat{a}^\dagger_i \hat{a}^\dagger_j \hat{a}_k \hat{a}_l \tag{49a}$$

$$V^{AA}_{ijkl} = \int dx \int dx' \phi^*_{i,A}(x)\phi^*_{j,A}(x') V_{AA}(x,x')\phi_{k,A}(x')\phi_{l,A}(x) \ . \tag{49b}$$

Dla dwuskładnikowej mieszaniny z oddziaływaniami międzyskładnikowymi natomiast otrzymuje się:

$$\hat{H} = \sum_m^\infty \epsilon^A_m \hat{a}^\dagger_m \hat{a}_m + \sum_m^\infty \epsilon^B_m \hat{b}^\dagger_m \hat{b}_m + \sum_{ijkl}^K V^{AB}_{ijkl} \hat{a}^\dagger_i \hat{b}^\dagger_j \hat{b}_k \hat{a}_l \tag{50a}$$

$$V^{AB}_{ijkl} = \int dx \int dx' \phi^*_{i,A}(x)\phi^*_{j,B}(x') V_{AB}(x,x')\phi_{k,B}(x')\phi_{l,A}(x) \ . \tag{50b}$$

Współczynniki $\epsilon^A_m$, $\epsilon^B_m$ to energie własne stanów jednocząstkowych dla poszczególnych składników. Hamiltoniany w takiej postaci mogą zostać zapisane jako macierze, których elementy $\langle\Phi|\,\hat{H}\,|\Psi\rangle$ zbudowane są ze współczynników $\epsilon^\sigma_m$ oraz $V^{\sigma\sigma'}_{ijkl}$. W takich macierzach, część nieoddziałująca hamiltonianu znajduje się na diagonali. Dla stanu bazowego $|\Psi\rangle$ wkład z tej część hamiltonianu jest równy $\sum_\sigma \sum_i^{N_\sigma} \epsilon^\sigma_{m_{i,\sigma}}$. Współczynniki $V^{\sigma\sigma'}_{ijkl}$ opisują sprzężenie między poszczególnymi stanami bazowymi i co za tym idzie odpowiadają za pozadiagonalne elementy macierzowe. Jednocześnie sprzężone są ze sobą tylko stany wielocząstkowe, w których co najwyżej dwie cząstki znajdują się w innych stanach jednocząstkowych. Oznacza to, że w przypadku mieszanin z liczbą cząstek istotnie większą niż dwa, zdecydowana większość stanów nie jest ze sobą sprzężona. W związku z tym hamiltonian w tej reprezentacji jest macierzą rzadką.

Następnym krokiem w metodzie ścisłej diagonalizacji jest znalezienie wektorów i wartości własnych zdefiniowanej powyżej macierzy. Niestety jest nieskończenie wiele wektorów bazowych, w związku z czym hamiltonian w reprezentacji macierzowej jest również nieskończony.

Taka macierz nie może być zdiagonalizowana numerycznie. Jednakże w tym wypadku poszukiwane są wyłącznie niskoenergetyczne stany własne. Można się spodziewać, że elementy macierzowe odpowiadające stanom o bardzo wysokiej energii mają znikomy wpływ na szukane stany własne. Nasuwa to pomysł, aby zignorować wysokoenergetyczne stany bazowe i tym samym przybliżyć analizowany hamiltonian przez macierz o skończonej liczbie elementów. Jednym ze sposobów na to jest wprowadzenie tzw. obcięcia (ang. cutoff) stanów jednocząstkowych $K$ [79]. W tym podejściu ignorowane są wielocząstkowe stany bazowe, w których co najmniej jedna z cząstek znajduje się w stanie $\phi_m(x)$ dla $m > K$, gdzie stany jednocząstkowe są posortowane rosnąco względem ich energii. Po zastosowaniu tego obcięcia hamiltonian ruchu względnego ma postać:

$$\hat{H}^K_{rel} = \sum_{m}^{K} \epsilon^A_m \hat{a}^\dagger_m \hat{a}_m + \sum_{ijkl}^{K} V_{ijkl} \hat{a}^\dagger_i \hat{a}^\dagger_j \hat{a}_k \hat{a}_l \ . \tag{51}$$

Taki hamiltonian, reprezentowany przez skończoną macierz o rozmiarze $\binom{K}{N_A}$, można częściowo zdiagonalizować w celu znalezienia niskoenergetycznych stanów własnych. Jednocześnie jasnym jest, że w granicy $K \to \infty$ uzyskane stany własne dążą do rozwiązań ścisłych. Co za tym idzie obcięcie $K$ jest parametrem decydującym o dokładności obliczeń numerycznych i poprzez jego zwiększanie można uzyskać dowolną pożądaną dokładność. W przypadku układu dwuskładnikowego można wprowadzić dwa niezależne parametry obięcia $K_A$ oraz $K_B$, osobno dla obydwu składników. Wówczas macierz ma rozmiar $\binom{K_A}{N_A}\binom{K_B}{N_B}$.

Istnieją różne metody numeryczne pozwalające w wydajny sposób znaleźć najmniejsze wartości własne macierzy rzadkiej oraz odpowiadające im wektory własne. Najbardziej znaną jest metoda Arnoldiego [80]. Specjalna wersja tego algorytmu stosowana dla macierzy hermitowskich (takimi macierzami są hamiltoniany) nazywana jest metodą Lanczosa. Oprócz tego istnieje również metoda Krylova-Schura, która może być postrzegana jako usprawnienie metody Arnoldiego [81]. Stosowana jest również metoda Jacobiego-Davidsona [82]. Niezależnie od tego, którą z tych metod się wybierze, jako wynik otrzymuje się poszukiwane energie i stany własne. W połączeniu z analitycznym rozwiązaniem dla hamiltonianu środka masy, pozwala to obliczyć podstawowe własności stanu podstawowego i niskoenergetycznych stanów wzbudzonych.

## 4.2 Porównanie metod

Przedstawiona w tym rozdziale metoda ścisłej diagonalizacji może być zastosowana bezpośrednio na hamiltonianie dla problemu polaronu fermionowego w pułapce harmonicznej. Podejście to wiąże się jednak z dużym zużyciem zasobów obliczeniowych w przypadku silnych

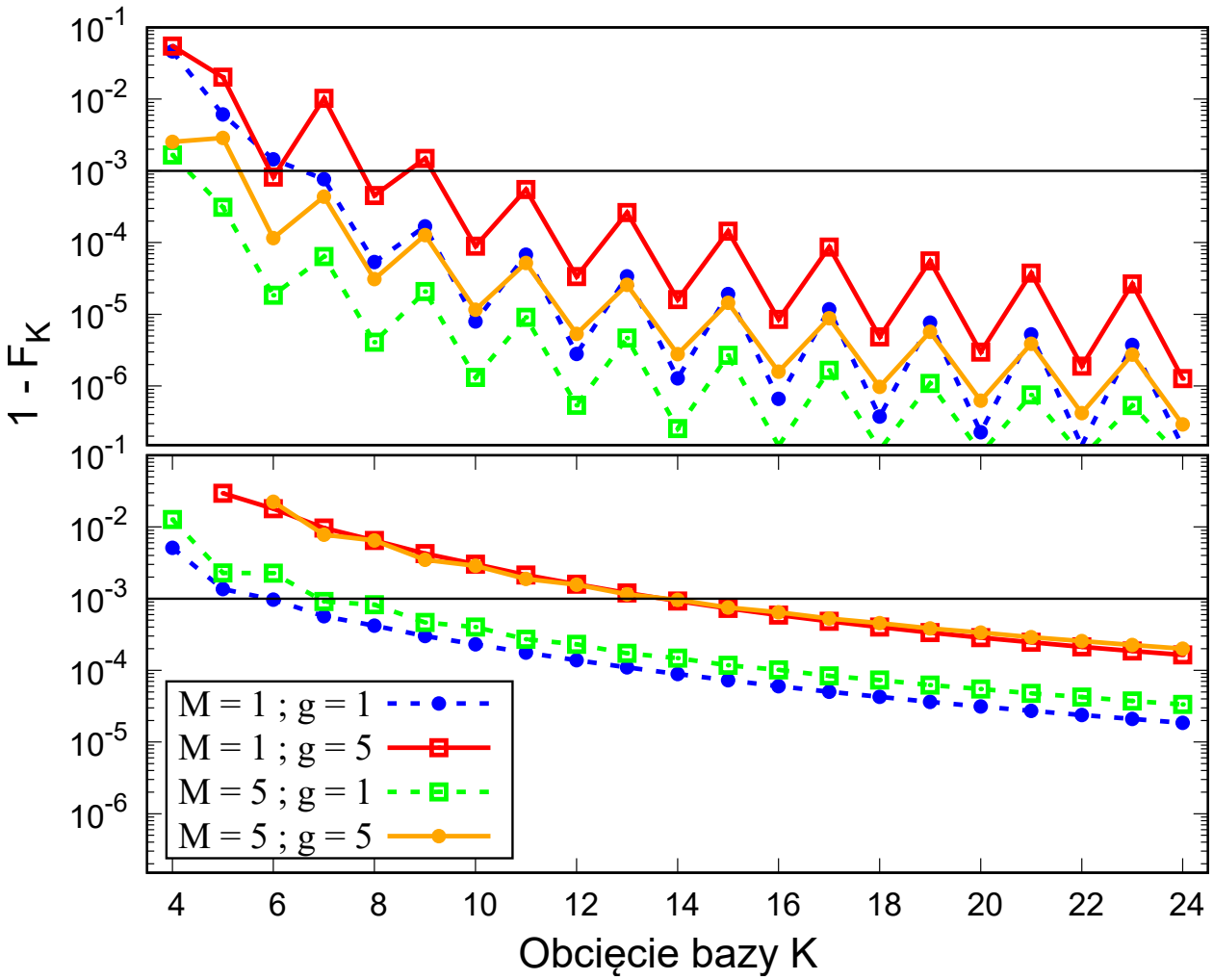
oddziaływań, przez co może być stosowane tylko dla bardzo małych mieszanin. Alternatywnie, hamiltonian może zostać przekształcony z użyciem uogólnionej transformacji LLP. Wówczas tylko analiza ruchu względnego wymaga użycia metody ścisłej diagonalizacji. Jasnym jest, że przynajmniej dla silnych oddziaływań i ciężkiej niejednorodności takie podejście jest bardziej optymalne. Po pierwsze dlatego, że układ zostaje przekształcony z silnieoddziałującego na słabooddziałujący. Po drugie, ponieważ hamiltonian całego układu w postaci macierzowej ma rozmiar $\binom{K_A}{N}\binom{K_B}{1}$, a więc jest $K_B$ razy większy od hamiltonianu ruchu względnego z analogicznym obcięciem. Warto jednak porównać te dwa podejścia w sposób ilościowy. Aby móc przeprowadzić to porównanie przyjmuję, że dwa parametry obcięcia występujące w metodzie ścisłej diagonalizacji dla układu dwuskładnikowego są sobie równe ($K = K_A = K_B$). W ten sposób obie metody mają po jednym parametrze numerycznym.

Jasnym jest, że w przypadku obu metod stany własne dążą do rozwiązań ścisłych, gdy obcięcie stanów jednocząstkowych dążą do nieskończoności. Jednocześnie im większa wartość obcięcia $K$ tym wyższe jest zużycie zasobów obliczeniowych. W związku z tym, aby skutecznie stosować te metody potrzebne jest narzędzie, które pozwoli ustalić dla jakiej wartości obcięcia osiąga się wystarczająco dobrą dokładność numeryczną. Do tego celu zostanie wykorzystana tak zwana wierność (ang. fidelity) $F = |\langle\psi|\phi\rangle|$, która jest jedną z możliwych miar tego jak podobne są do siebie dwa stany kwantowe [83]. Dla stanów ortogonalnych ta wielkość jest równa 0, natomiast dla dwóch identycznych stanów wynosi 1. W tym wypadku porównywane są stany własne uzyskane dla kolejnych wartości obcięcia $K$ [84]:

$$F_K = \left|\left\langle \Psi^K \middle| \Psi^{K+1} \right\rangle\right| \ . \tag{52}$$

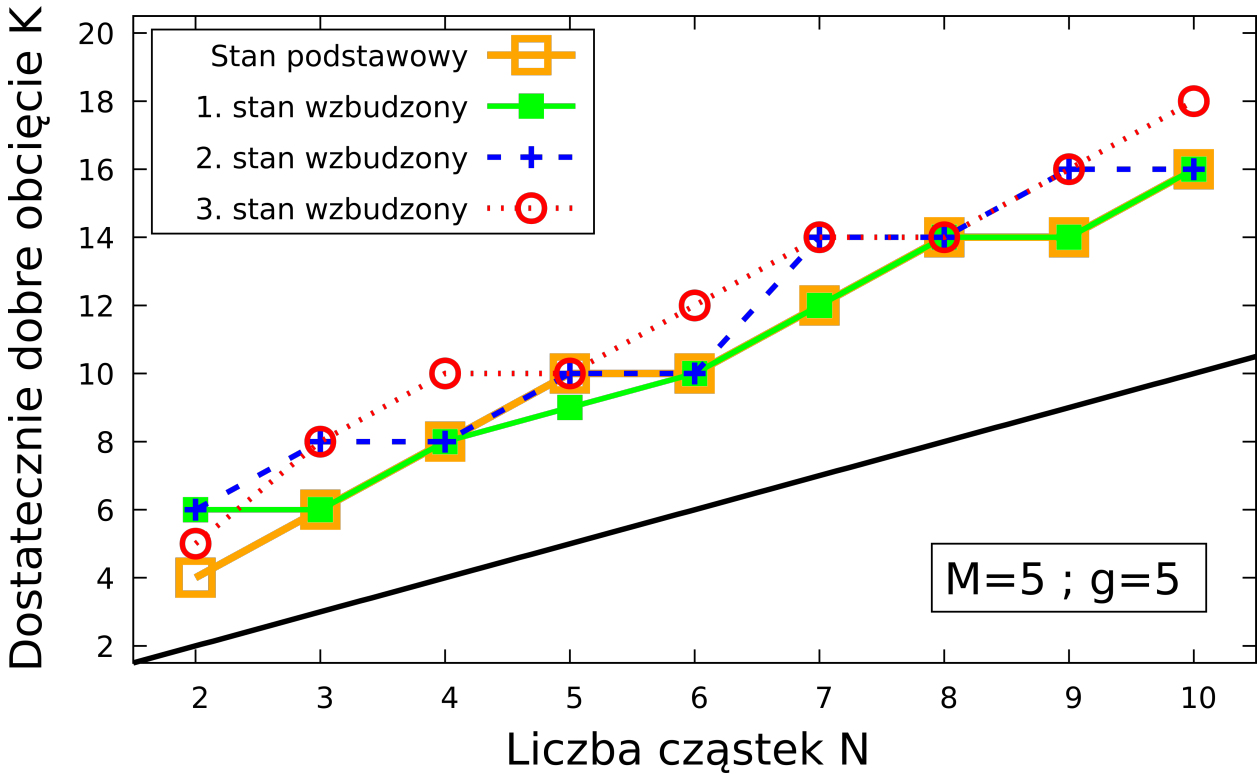
Wraz ze zwiększaniem wartości $K$, różnice między kolejnymi wektorami $\left|\Psi^K\right\rangle$ oraz $\left|\Psi^{K+1}\right\rangle$ powinny maleć, a więc $F_K$ powinno dążyć do jedności. Wierność $F_K$ niekoniecznie rośnie monotonicznie wraz ze zwiększaniem obcięcia $K$, ale ogólny trend powinien być rosnący. Dla odpowiednio dużych wartości $F_K$ różnice między kolejnymi iteracjami wektora $\left|\Psi^K\right\rangle$ są pomijalne i można przyjąć, że jest to dobre przybliżenie faktycznego stanu kwantowego. W tej rozprawie jako wartość graniczną przyjęte jest 0.999. Oznacza to, że do obliczenia wyników zaprezentowanych w następnych rozdziałach, wybrane zostały najmniejsze obcięcia $K$ takie, że dla każdego $K' \geq K$ zachodzi $F_{K'} > 0.999$. W dalszym tekście te obcięcia będą określane jako *obcięcia dostatecznie dobre*.

Porównanie wierności stanów podstawowych $F_K$ dla prezentowanej metody oraz dla typowej ścisłej diagonalizacji dla przykładowej mieszaniny składającej się z niejednorodności i trzech fermionów znajduje się na rysunku 1. Porównanie zostało przeprowadzone dla średnich i silnych oddziaływań (odpowiednio $g = 1$ oraz $g = 5$) w przypadku równych mas oraz




Rysunek 1: Wierność stanu podstawowego w funkcji obcięcia $K$ dla różnych wartości stosunku mas oraz siły oddziaływań w układzie $1+3$. Wyniki uzyskane z użyciem uogólnionej transformacji LLP oraz dla zwyczajnej ścisłej diagonalizacji są odpowiednio na górnym i dolnym wykresie. Rysunek zaadaptowany z pracy [1] za zgodą wydawcy.

dla ciężkiej niejednorodności ($M = 1$ i $M = 5$). Dla czytelności wykresu na osi pionowej zamiast wierności $F_K$ znajduje się wielkość $1 - F_K$ w skali logarytmicznej. Wartość graniczna $F_K = 0.999$ została oznaczona czarną poziomą linią. Z wykresu widać, że zgodnie z przewidywaniami proponowana metoda sprawdza się znacznie lepiej w przypadku silnych oddziaływań międzyskładnikowych. Dzieje się tak nie tylko w przypadku ciężkiej niejednorodności, ale również dla równych mas, choć w mniejszym stopniu. W przypadku średnich oddziaływań również widać znaczną poprawę gdy $M = 5$. Dla równych mas oraz średniej siły oddziaływań wartości wierności dla obu metod są porównywalne. Niemniej nawet w tym przypadku proponowana metoda jest korzystniejsza, ponieważ jak wcześniej zostało wspomniane, diagonalizowana macierz jest $K$-krotnie mniejsza dzięki odseparowaniu środka




Rysunek 2: Dostatecznie dobre obcięcia $K$ w funkcji liczby cząstek dla ciężkiej niejednorodności i silnych oddziaływań. Czarna linia prezentuje najniższą możliwą wartość obcięcia dla $K = N$. Rysunek zaadaptowany z pracy [1] za zgodą wydawcy.

masy. Podsumowując, podejście wykorzystujące uogólnioną transformację LLP sprawdza się znacznie lepiej dla szerokiego zakresu parametrów układu. Jednocześnie jasnym jest, że radziłaby sobie gorzej dla mieszanin słabooddziałujących, a także w przypadku lekkiej niejednorodności. Wówczas lepiej użyć ścisłej diagonalizacji bezpośrednio na hamiltonianie (26), bez korzystania z uogólnionej transformacji LLP.

Jak zostało wspomniane wcześniej, zużycie zasobów obliczeniowych związane z metodą ścisłej diagonalizacji gwałtownie rośnie wraz z wartością obcięcia $K$ jak również z liczbą cząstek. Z drugiej strony obcięcie musi być dostatecznie duże, aby błędy numeryczne były na akceptowalnie niskim poziomie. To rodzi pytanie jak duże mogą być mieszaniny analizowane z użyciem metody zaprezentowanej w tej rozprawie. Odpowiedzią na nie jest wykres przedstawiony na rysunku 2, na którym zaprezentowane jest dostatecznie dobre obcięcia (czyli najmniejsze obcięcie $K$ takie, że dla każdego $K' \geq K$ zachodzi $F_{K'} > 0.999$), w funkcji liczby fermionów. Wyniki dla stanu podstawowego i niskoenergetycznych stanów wzbudzonych zostały przedstawione w przypadku ciężkiej niejednorodności i silnych oddziaływań ($M = 5$ oraz $g = 5$) ponieważ jest to optymalny reżim parametrów do stosowania tej metody. Z wykresu widać, że dla układów z małą liczbą cząstek ($N = 2, 3, 4$) obcięcia są ponad

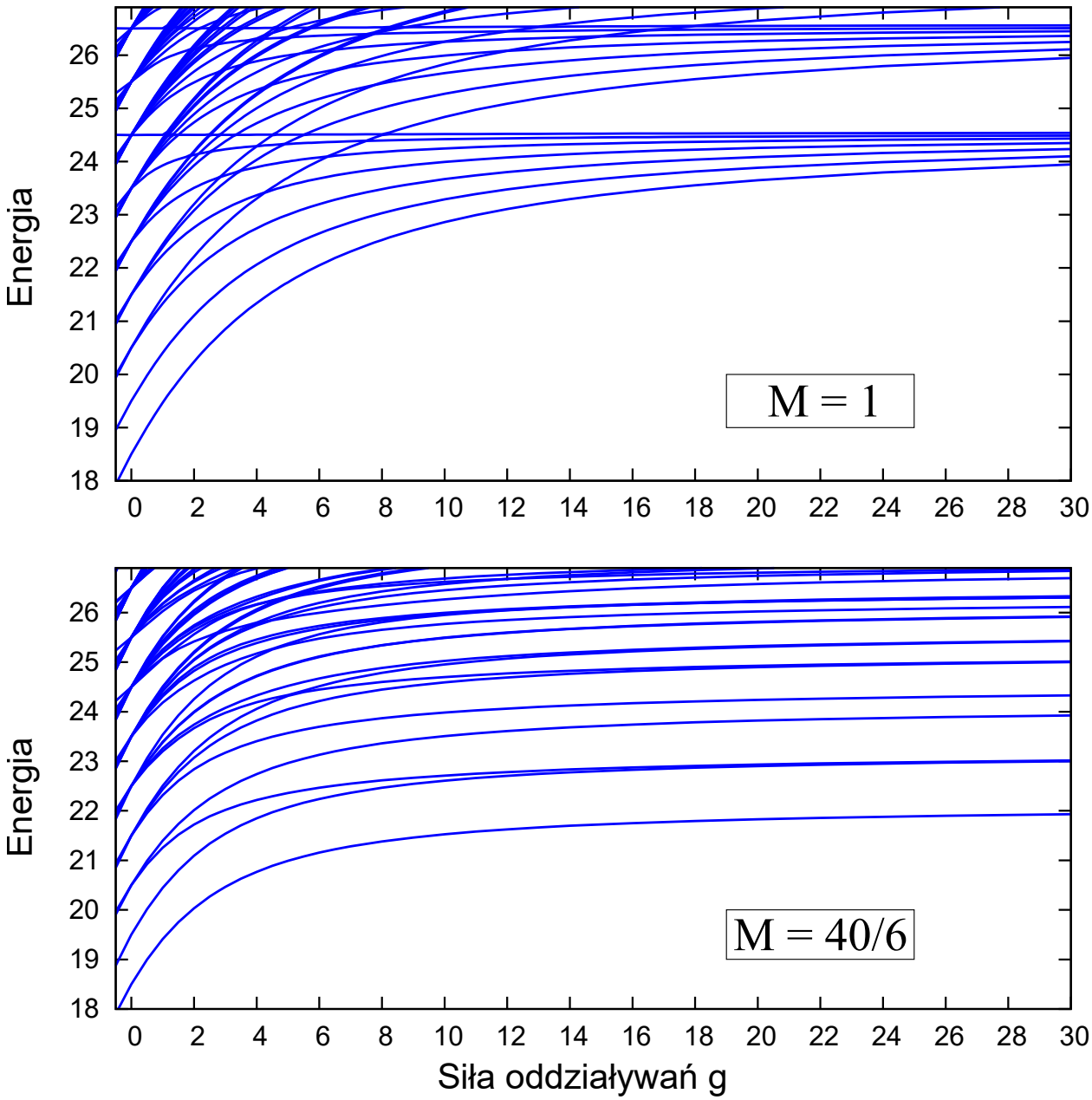
dwa razy większe niż $N$ jednak dla większych mieszanin stosunek między $N$ i $K$ nie jest tak pesymistyczny. Przykładowo, aby znaleźć trzeci stan wzbudzony dla mieszaniny 10+1 należy użyć obcięcia $K = 18$. Wówczas zgodnie ze wzorem $\binom{K}{N}$ hamiltonian macierzy ma rozmiar $\binom{18}{10} = 43758$. Biorąc pod uwagę, że jest to macierz rzadka, znalezienie niskoenergetycznych stanów własnych nie stanowi problemu dla współczesnych komputerów.

# 5 Własności stanów własnych

## 5.1 Energie własne

Przy użyciu uogólnionej transformacji LLP oraz metody ścisłej diagonalizacji można znaleźć energie i wektory własne stanu podstawowego oraz niskoenergetycznych wzbudzeń hamiltonianu (28). Jednakże te wyniki uzyskuje się dla hamiltonianu przekształconego do współrzędnych środka masy i ruchu względnego, a nie dla hamiltonianu we współrzędnych położeń. Nie jest rzeczą oczywistą, które własności hamiltonianu $\hat{H}[y, \partial_y]$ można w wydajny sposób wyznaczyć z wyników otrzymanych dla hamiltonianu przekształconego $\hat{S}^{-1}[y, \partial_y]\hat{H}[y, \partial_y]\hat{S}[y, \partial_y]$. Na szczęście energie własne są jedną z takich wielkości. Transformacje unitarne nie zmieniają bowiem wartości własnych operatorów, w związku z czym hamiltonian po transformacji ma takie same spektrum energetyczne jak przed jej wykonaniem.

Energie własne całego układu są równe sumie energii własnych hamiltonianu środka masy (40) oraz hamiltonianu ruchu względnego $\mathcal{E}_{nm} = E_n + \epsilon_m$. Te pierwsze mają prostą postać $E_n = n + \frac{1}{2}$. Oznacza to, że wzbudzenia związane z ruchem środka masy podnoszą energię układu o stałą wartość niezależną od siły oddziaływania $g$, stosunku mas $M$ czy liczby cząstek $N$. W związku z tym całkowite spektrum energetyczne układu w funkcji dowolnego z tych parametrów ma kształt widma wzbudzeń ruchu względnego powielonego dla kolejnych wartości liczby kwantowej $n$. Przykładowe spektra energetyczne dla stanu podstawowego środka masy ($n = 0$) są przedstawione na rysunku 3. Wykresy przedstawiają wyniki dla układu z $N = 6$ fermionami w przypadku równych mas ($M = 1$) oraz dla ciężkiej niejednorodności. W tym drugim przypadku stosunek mas wynosi $M = \frac{40}{6}$ co odpowiada mieszaninie fermionowych izotopów litu i potasu. Z wykresów widać, że dla równych mas i dużej siły oddziaływań poziomy energetyczne grupują się w podprzestrzenie quasizdegenerowane. W szczególności w granicy nieskończonych oddziaływań, odpowiednie stany stają się zdegenerowane. Dzieje się tak, ponieważ dochodzi do fermionizacji mieszaniny [85], tzn. energie stanów własnych są takie same jak dla nieoddziałującego układu $N + 1$ fermionów. Jednak w przeciwieństwie do układu $N + 1$ jednakowych fermionów, funkcje falowe stanów własnych rozważanego układu nie są antysymetryczne względem zamiany miejscami jednego z fermionów z niejednorodnością. To prowadzi do degeneracji. W ogólności, dla dwuskładnikowej mieszaniny $N + L$ fermionów w granicy nieskończonych oddziaływań, fermionizacja prowadzi do $\binom{N+L}{N}$-krotnej degeneracji stanów własnych (tyle jest rozróżnialnych kombinacji ułożenia cząstek), co dla L=1 daje degeneracje stopnia $N + 1$. W przypadku różnych mas ten efekt nie występuje, więc kwasi-degeneracja stanów własnych dla silnych oddziaływań jest mniejsza (dolny panel rysunku 3). Efekt ten był już zbadany wcześniej w literaturze [86].



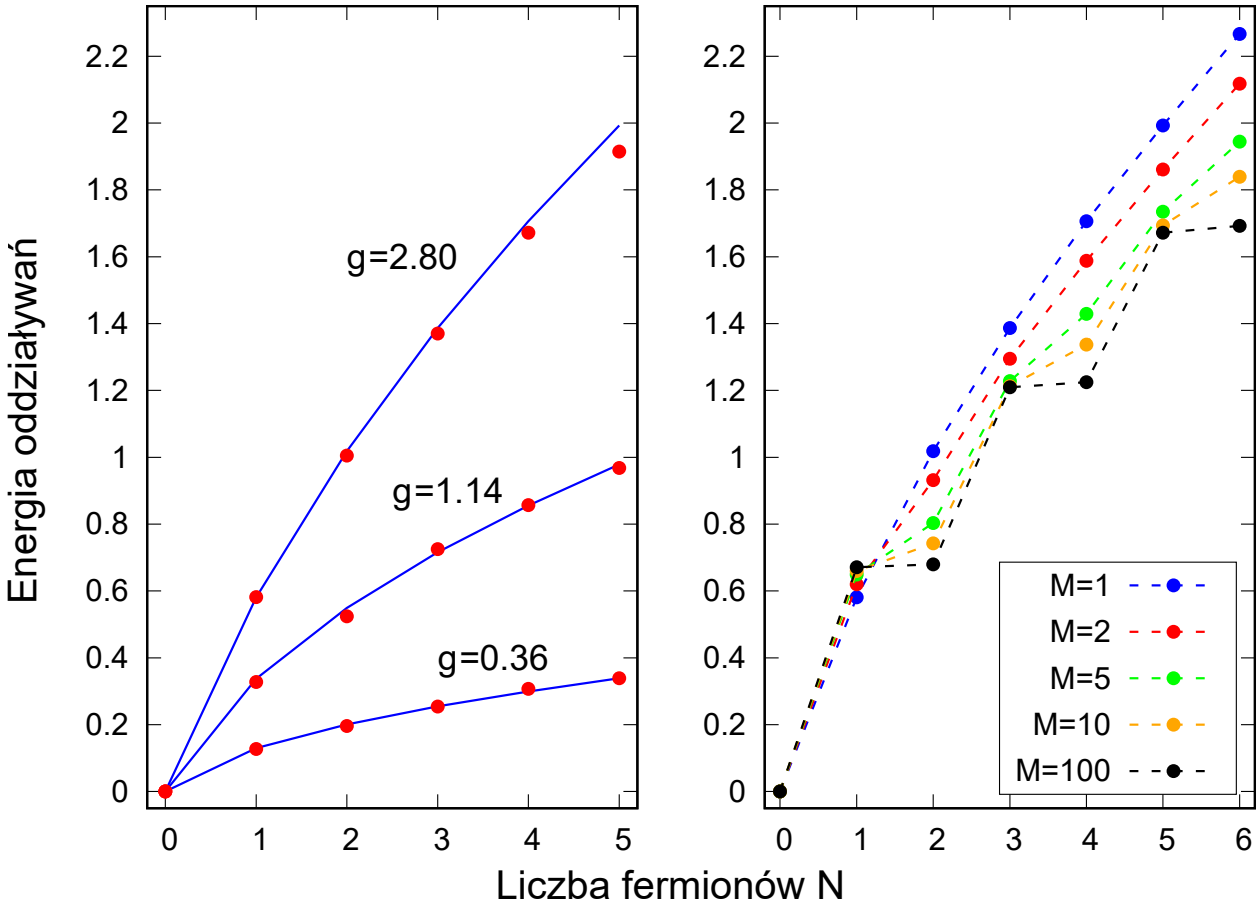

Rysunek 3: Spektrum energetyczne (w stanie podstawowym ruchu środka masy) jako funkcja siły oddziaływań dla układu $6+1$ cząstek w przypadku $M=1$ oraz $M=\frac{40}{6}$ (odpowiednio górny i dolny wykres). Energia i siła oddziaływań wyrażone są w naturalnych jednostkach dla problemu oscylatora harmonicznego, odpowiednio $\hbar\omega$ oraz $\sqrt{\hbar^3\omega/m}$

Jednowymiarowe układy kilku ultrazimnych atomów są trudne w realizacji doświadczalnej. Istnieje zatem niewiele wyników eksperymentalnych, z którymi można porównać wyniki teoretyczne. Niemniej dla analizowanego w tej rozprawie problemu małego polaronu fermionowego, takie dane istnieją w przypadku równych mas. W eksperymencie z 2013 roku [39] udało się wytworzyć mieszaniny $N+1$ ultrazimnych atomów litu, gdzie $N$ przyjmowało

wartości od 1 do 5. Układy znajdowały się z dobrym przybliżeniem w stanie podstawowym. Odpowiadające tym stanom kwantowym energie nie mogły być zmierzone bezpośrednio, ponieważ w eksperymentach mierzy się różnice energii, a nie ich absolutne wartości. W związku z tym na potrzeby doświadczenia wykorzystywano pomocniczą wielkość nazwaną energią oddziaływania. Jest ona zdefiniowana jako różnica między energią stanu podstawowego układu w którym cząstki oddziałują ze sobą z siłą $g$ a energią stanu podstawowego dla analogicznej mieszaniny, ale z wyłączonymi oddziaływaniami, $\mathcal{E}_{int} = \mathcal{E}_0(g) - \mathcal{E}_0(0)$. Z teoretycznego punktu widzenia ta wielkość nie jest skomplikowana. Energia stanu podstawowego dla nieoddziałujących fermionów w jednowymiarowej pułapce harmonicznej jest znana ściśle i dla mieszaniny $N+1$ cząstek wynosi $\mathcal{E}_0(0) = \frac{1}{2} + \sum_{n=0}^{N}(n+\frac{1}{2}) = \frac{N^2+1}{2}$. W związku z tym obliczone energie stanu podstawowego dla układów oddziałujących mogą być wprost przetłumaczone na energię oddziaływania.

Zdefiniowana powyżej energia oddziaływania dla problemu małego polaronu fermionowego w pułapce harmonicznej została zmierzona doświadczalnie [39]. Metoda pomiaru bezpośredniego wykorzystuje fakt, że zastosowane są atomy tego samego pierwiastka w różnych stanach nadsubtelnych. Dzięki temu, za pomocą impulsu radiowego można zmienić stan nadsubtelny niejednorodności. Tym samym układ $N$ fermionów z pojedynczą niejednorodnością można na żądanie zamienić na jednoskładnikową mieszaninę $N+1$ fermionów. Ponieważ między identycznymi fermionami nie występują oddziaływania kontaktowe (s-wave), energia układu po użyciu impulsu radiowego nie zależy od energii oddziaływania. Z drugiej strony początkowa energia jest przesunięta o wartość energii oddziaływania względem układu nieoddziałującego. Oznacza to, że częstotliwość impulsu radiowego, dla którego zachodzi zmiana stanu nadsubtelnego niejednorodności również jest przesunięta proporcjonalnie do energii oddziaływań. A więc mierząc to przesunięcie częstotliwości otrzymuje się poszukiwaną wielkość.

Otrzymane energie oddziaływania w funkcji liczby cząstek znajdują się na rysunku 4. Na lewym panelu widnieje porównanie wyników eksperymentalnych z przewidywaniami teoretycznymi dla równych mas ($M = 1$) i trzech różnych sił oddziaływań. Jak widać wyniki numeryczne są zgodne z doświadczeniem. Wyjątkiem zdaje się być wynik dla $N = 5$ fermionów w przypadku silnych oddziaływań. Wówczas dla obliczonej energii oddziaływań $\mathcal{E}_{int} = 1.993$ (w jednostkach oscylatorowych) występuje różnica rzędu 0.1 względem wyniku doświadczalnego, co przekłada się na błąd względny rzędu 5%. Należy jednak pamiętać, że w symulacji numerycznej liczona jest energia stanu podstawowego, która w tym wypadku jest o rząd wielkości większa niż energia oddziaływań $\mathcal{E}_0(g) = \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_0(0) = 14.993$ (w jednostkach oscylatorowych). Dla energii stanu podstawowego błąd względny jest mniejszy niż 1%.




Rysunek 4: Lewy panel: Energia oddziaływania w funkcji liczby fermionów $N$ dla równych mas ($M = 1$) zmierzona w eksperymencie [39] (czerwone kropki) oraz obliczona numerycznie (niebieskie linie). Wyniki dla słabych ($g = 0.36$), średnich ($g = 1.14$) i silnych oddziaływań ($g = 2.80$). Prawy panel: Analogiczny wykres obliczonych numerycznie energii oddziaływania dla $g = 2.80$, ale dla różnych stosunków mas. Energia wyrażona jest w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\hbar\omega$. Rysunek zaadaptowany z pracy [1] za zgodą wydawcy.

Prawy panel rysunku 4 przedstawia energie oddziaływań obliczone dla $g = 2.8$, dla różnych wartościach stosunku mas $M$. Jak widać z wykresu, dla bardzo ciężkiej niejednorodności wykres jakościowo różni się od przypadku równych mas. We wszystkich przypadkach $\mathcal{E}_{int}$ rośnie monotonicznie w funkcji liczby cząstek, ale dla dużych wartości $M$ ten przyrost ma skokowy charakter. Dla mieszaniny z nieparzystą liczbą fermionów dodanie kolejnej cząstki wiąże się z mniejszym przyrostem energii oddziaływania niż dla analogicznej sytuacji w przypadku parzystym. W granicy nieskończonego stosunku mas dodanie takiej cząstki zupełnie nie zmienia energii oddziaływania. Stosując uogólnioną metodę LLP można dość prosto wyjaśnić skąd bierze się ten efekt. Po pierwsze, korzystając z zaprezentowanej w poprzednim rozdziale transformacji można odseparować ruch środka masy, który nie ma wpływu na

energię oddziaływań, ponieważ nie zależy od siły oddziaływania $g$. W granicy $M \to \infty$, hamiltonian ruchu względnego (42a) bardzo się upraszcza. Efektywne oddziaływanie między fermionami zanika, ponieważ jest odwrotnie proporcjonalne do stosunku mas. W związku z tym ruch względny opisywany jest poprzez nieoddziałujący hamiltonian:

$$\hat{H}_{rel} = \int dx\ \hat{\psi}^{\dagger}(x) \left( -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}x^2 + g\delta(x) \right) \hat{\psi}(x)\ . \tag{53}$$

Stan podstawowy tego hamiltonianu jest wyznacznikiem Slatera kolejnych jednocząstkowych orbitali własnych. W związku z tym energia stanu podstawowego jest sumą kolejnych jednocząstkowych energii własnych. Te energie są znane, co zostało pokazane w podrozdziale 2.3. Dla stanów parzystych wynoszą $\epsilon_m = m + \frac{1}{2}$, natomiast dla stanów nieparzystych są opisywane przez warunek $\frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}-\frac{\epsilon_m}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}-\frac{\epsilon_m}{2}\right)} = -\frac{g}{2\sqrt{2}}$. Co ważne energia fermionu w stanie parzystym nie zależy od siły oddziaływania. Oznacza to, że jeżeli do mieszaniny z nieparzystą liczbą fermionów dodana zostanie kolejna cząstka, to przyrost energii stanu podstawowego jest taki sam, niezależnie czy w układzie występują oddziaływania międzycząstkowe, czy nie. Ale z tego wynika, że energia oddziaływania nie ulegnie zmianie. Tak więc w granicy nieskończonie masywnej niejednorodności, energia oddziaływania w funkcji liczby cząstek ma kształt funkcji schodkowej. Jest to przypadek graniczny tego co widać na rysunku 4. Powyższa analiza pokazuje, że prezentowana w tej rozprawie transformacja pozwala nie tylko na wydajne obliczenia numeryczne, ale może być też pomocna w rozważaniach fenomenologicznych i prowadzić do lepszego zrozumienia zjawisk zachodzących w układzie.

## 5.2 Profile gęstości

Oprócz energii własnych prezentowana metoda pozwala również na znalezienie wektorów własnych układu. Dla przetransformowanego hamiltonianu $\hat{S}^{-1}[y,\partial_y]\hat{H}[y,\partial_y]\hat{S}[y,\partial_y]$, stany własne $\Phi_n(y) \otimes |\Omega_m\rangle$ są iloczynami tensorowymi wektorów własnych hamiltonianu ruchu środka masy (40) i hamiltonianu ruchu względnego (42a). Pierwsze z nich mają postać analityczną, a drugie można wyznaczyć przy użyciu metody ścisłej diagonalizacji. Znając wektor stanu kwantowego można następnie znaleźć dla niego jednociałowe profile gęstości.

Jednociałowy profil gęstości $n(x)$ opisuje średnią gęstość liczbową cząstek danego typu w pozycji $x$. Dla układu cząstek opisywanego w języku pierwszej kwantyzacji funkcją falową $\Psi(x_1, ..., x_N)$, profil gęstości danego składnika jest równy $n(x) = \int dx_2 ... dx_N |\Psi(x, x_2, ..., x_N)|^2$. W przypadku nierozróżnialnych cząstek stosuje się formalizm drugiej kwantyzacji i profil gęstości dla układu w stanie $|\Psi\rangle$ ma postać $n(x) = \langle\Psi|\, \hat{\psi}^{\dagger}(x)\hat{\psi}(x)\, |\Psi\rangle$, gdzie $\hat{\psi}(x)$ to operator pola w reprezentacji położeniowej. Przypomnijmy, że w mojej rozprawie wykorzystywana

jest mieszana kwantyzacja, w której wektory stanów kwantowych są elementami przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{F}(\mathcal{H})$ i w ogólności mogą być postaci $|\Psi(y)\rangle = \sum_{nm} A_{nm}\psi_n(y) \otimes |\phi_m\rangle$. W tym wypadku jednociałowe profile gęstości, odpowiednio dla niejednorodności i dla fermionów, wyrażają się jako:

$$n_I(y) = \langle\Psi(y)|\Psi(y)\rangle \tag{54a}$$

$$n_F(x) = \int dy \, \langle\Psi(y)| \, \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \, |\Psi(y)\rangle \ . \tag{54b}$$

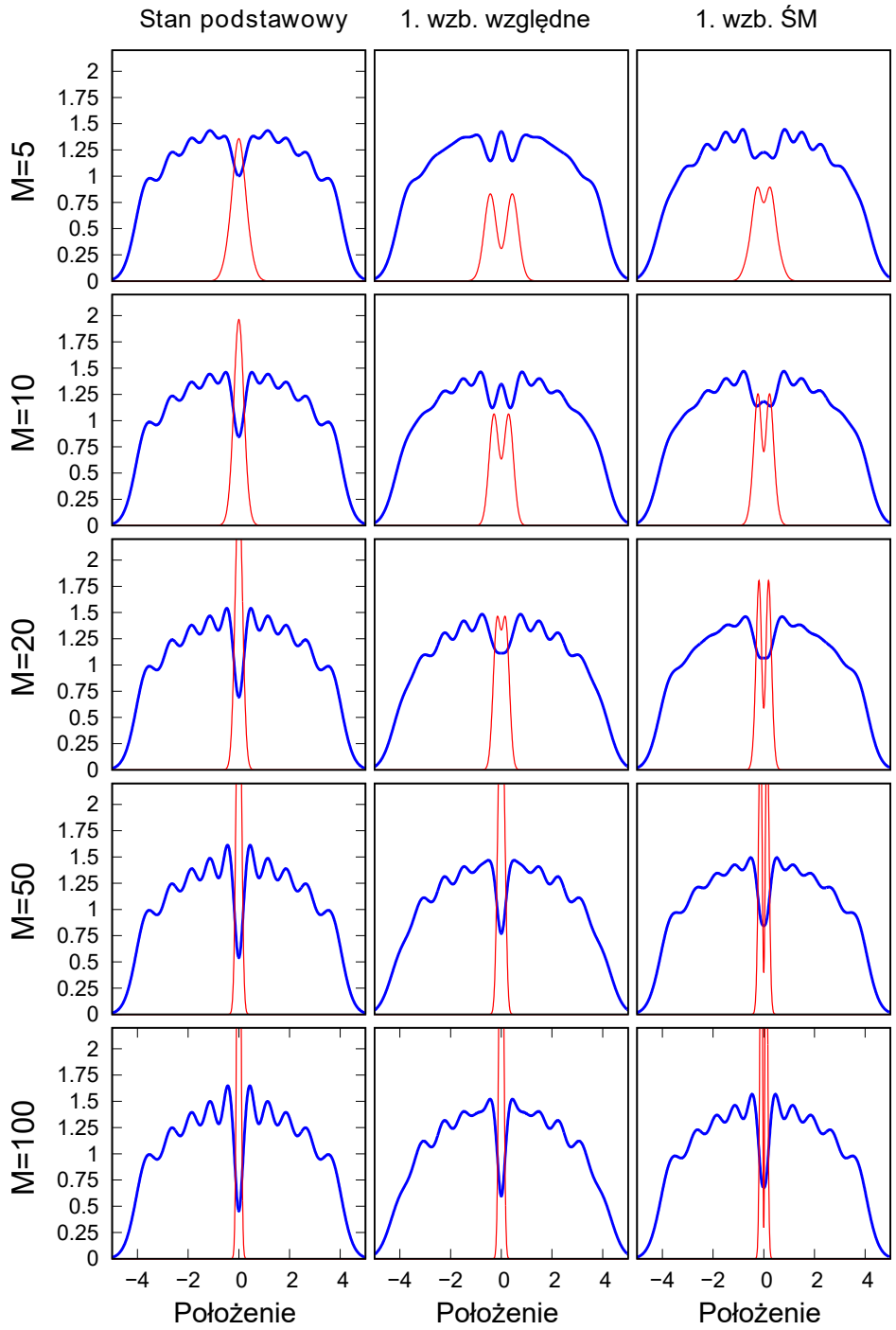
Niestety, aby znaleźć te wielkości dla stanów własnych hamiltonianu $\hat{H}[y, \partial_y]$ trzeba dysponować wektorami stanów kwantowych we współrzędnych niejednorodności i fermionów, a uzyskane w poprzednim rozdziale wektory własne są wyznaczone we współrzędnych środka masy i ruchu względnego. Z tego powodu najpierw trzeba przekształcić te stany własne do pierwotnych współrzędnych wykorzystując transformację odwrotną:

$$\begin{aligned}\hat{S}[y, \partial_y]\Phi_n(y) \, |\Omega_m\rangle &= \exp\left(-iy\hat{p}\right) \exp\left(\frac{\hat{x}\partial_y}{M+N}\right) \Phi_n(y) \, |\Omega_m\rangle = \\ &= \exp\left(-iy\hat{p}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\hat{x}}{M+N}\right)^n \partial_y^n \Phi_n(y) \, |\Omega_m\rangle \coloneqq \\ &\coloneqq \exp\left(-iy\hat{p}\right) \bar{\Phi}_n\left(y + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) |\Omega_m\rangle \ .\end{aligned} \tag{55}$$

Symbol $\bar{\Phi}_n()$ oznacza naturalne rozszerzenie funkcji $\Phi_n()$ na operatory. Jego ścisłą definicją jest szereg Taylora w poprzednim wierszu równania. W celu zapisania przetransformowanego wektora w bazie Focka należy jawnie zadziałać operatorami na wektor $|\Omega_m\rangle$, co może być problematyczne. Problem wynika z faktu, że operator $\exp\left(-iy\hat{p}\right)$ w działaniu na wektory bazowe przestrzeni Focka powoduje ich przesunięcie o wartość $-y$ w reprezentacji położeniowej. W związku z tym trzeba rozłożyć wszystkie takie przesunięte wektory bazowe w oryginalnej bazie Focka. Zrobienie tego w sposób wydajny nie jest trywialne. Na szczęście istnieje alternatywne podejście do tego problemu. Celem jest bowiem znalezienie profili gęstości, które mają ogólną postać $\langle\Phi| \, e^{iy\hat{p}}\hat{A}e^{-iy\hat{p}} \, |\Phi\rangle$. W związku z tym, zamiast działać operatorem $\exp\left(-iy\hat{p}\right)$ na wektor, można zadziałać transformacją unitarną na operator w środku wyrażenia. Korzystając z tego, że $e^{iy\hat{p}}\hat{\psi}(x)e^{-iy\hat{p}} = \hat{\psi}(x-y)$, profile gęstości można zapisać jako:

$$n_I(y) = \langle\Omega_m| \, \bar{\Phi}_n^*\left(y + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) \bar{\Phi}_n\left(y + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) |\Omega_m\rangle \tag{56a}$$

$$n_F(x) = \int dy \, \langle\Omega_m| \, \bar{\Phi}_n^*\left(y + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) \hat{\psi}^\dagger(x-y)\hat{\psi}(x-y)\bar{\Phi}_n\left(y + \frac{\hat{x}}{M+N}\right) |\Omega_m\rangle \tag{56b}$$




Rysunek 5: Jednocząstkowe profile gęstości dla niejednorodności (cienka czerwona linia) i dla fermionów (gruba niebieska linia); parametry układu: liczba fermionów $N = 10$, siła oddziaływań $g = 5$, stosunek mas $M = 5, 10, 20, 50, 100$. Trzy kolumny prezentują wynika dla stanu podstawowego i pierwszych stanów wzbudzonych, odpowiednio dla ruchu względnego i ruchu środka masy. Położenie wyrażone jest w naturalnych jednostkach oscylatora harmonicznego $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Rysunek zaadaptowany z pracy [1] za zgodą wydawcy.

Znalezienie profili gęstości w takiej postaci nadal jest nietrywialne, ze względu na operator $\hat{x}$ występujący w funkcji własnej ruchu środka masy. Następny krok polega na zdiagonalizowaniu tego operatora w obciętej przestrzeni Focka, w której prowadzona jest analiza numeryczna. Obliczenie funkcji analitycznej od macierzy diagonalnej nie jest trudnym zadaniem. W związku z tym nic nie stoi na przeszkodzie, aby znaleźć profile gęstości stanów własnych układu.

Pełna diagonalizacja macierzy ma znacznie większą złożoność obliczeniową niż obliczanie niskoenergetycznego widma energetycznego. W związku z tym maksymalny rozmiar układu, dla którego można znaleźć profile gęstości przy danej ilości zasobów obliczeniowych jest mniejszy niż przy obliczaniu energii własnych. Niemniej, w przypadku ciężkiej niejednorodności obcięta przestrzeń Focka jest względnie mała i prezentowana tu metoda wciąż sprawdza się lepiej niż typowa ścisła diagonalizacja. Jako przykład, na rysunku 5. znajdują się profile gęstości dla układu $10 + 1$ cząstek. W poszczególnych wierszach znajdują się wyniki dla różnych stosunków mas, natomiast w kolumnach są wyniki kolejno dla stanu podstawowego i pierwszych stanów wzbudzonych ruchu środka masy oraz ruchu względnego. Z wykresów widać, że w wyniku separacji składników spowodowanej silnymi oddziaływaniami odpychającymi ($g = 5$) niejednorodność znajduje się w centrum pułapki. To gromadzenie się ciężkich atomów w środku pułapki jest znaną własnością masowo niezbalansowanych mieszanin w pułapce harmonicznej [86]. Widać również, że dla stanów wzbudzonych układ bardzo wolno zbiega do granicy nieskończenie masywnej niejednorodności. W związku z tym, nawet dla bardzo dużego stosunku mas, efekty związane ze skończoną masą niejednorodności mogą nie być pomijalne.

# 6 Kierunki dalszych prac i podsumowanie

## 6.1 Wyższe funkcje korelacji

Niniejsza rozprawa pokazała tylko fragment możliwości uogólnionej transformacji LLP. Jasnym jest, że ta metoda może mieć szersze zastosowania. Można ją łatwo uogólnić do układów o większej wymiarowości, jak również do innych potencjałów pułapkujących, dla których możliwa jest separacja środka masy. Mniej oczywiste jest to czy można znaleźć z jej pomocą jakieś inne własności analizowanego układu poza energiami własnymi i jednocząstkowymi profilami gęstości. W szczególności, przy analizie silnie oddziałujących mieszanin fermionowych ważnymi wielkościami są pozadiagonalne elementy zredukowanych macierzy gęstości, jak również profile gęstości wyższych rzędów, ponieważ zawierają w sobie informacje o kwantowych korelacjach między cząstkami.

Analogicznie do profili gęstości, pozadiagonalne elementy jednocząstkowej macierzy gęstości mają postać:

$$\rho_I(y,y') = \langle\Psi(y)|\Psi(y')\rangle \ , \tag{57a}$$

$$\rho_F(x,x') = \int dy\, \langle\Psi(y)|\, \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x')\, |\Psi(y)\rangle \ . \tag{57b}$$

dla $y \neq y'$ oraz $x \neq x'$. Dla morza fermionów, ta wielkość może zostać znaleziona tak samo jak w podrozdziale (5.2). Jako wynik otrzymuje się, że jednociałowa macierz gęstości w stanie własnym $\Phi_n(y)\,|\Omega_m\rangle$ jest równa:

$$\rho_F(x,x') = \int dy\, \langle\Omega_m|\, \bar{\Phi}_n^*\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)\hat{\psi}^\dagger(x-y)\hat{\psi}(x'-y)\bar{\Phi}_n\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)|\Omega_m\rangle \ . \tag{58}$$

Problemem jest natomiast obliczenie tej wielkości w przypadku niejednorodności. Wówczas otrzymuje się:

$$\rho_I(y,y') = \langle\Omega_m|\, \bar{\Phi}_n^*\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)\exp\left(iy\hat{p}\right)\exp\left(-iy'\hat{p}\right)\bar{\Phi}_n\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)|\Omega_m\rangle \ . \tag{59}$$

Dla $y \neq y'$ funkcje operatora $\hat{p}$ nie skracają się. Wówczas, aby znaleźć elementy macierzy gęstości, trzeba zadziałać operatorem $\exp\left(i(y-y')\hat{p}\right)$ na wektor $|\Omega_m\rangle$. W związku z tym zaprezentowana w podrozdziale (5.2) metoda jest niewystarczająca.

Inne rodzaje korelacji są opisywane przez wielociałowe macierze gęstości, które w ogól-

ności mają postać:

$$\rho(x_1,...,x_k,y;x'_1,...,x'_k,y') = \langle\Psi(y)|\,\hat{\psi}^\dagger(x_1)\cdot...\cdot\hat{\psi}^\dagger(x_k)\hat{\psi}(x'_k)\cdot...\cdot\hat{\psi}(x'_1)\,|\Psi(y')\rangle \ , \tag{60}$$

gdzie $k \leq N$. Pod warunkiem, że $y = y'$ ta wielkość może zostać zapisana analogicznie jak w przypadku jednociałowym:

$$\begin{aligned}\rho(x_1,...,x_k,y;x'_1,...,x'_k,y) = \langle\Omega_m|\,\bar{\Phi}^*_n\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)\hat{\psi}^\dagger(x_1-y)\cdot...\cdot\hat{\psi}^\dagger(x_k-y)\times \\ \times\,\hat{\psi}(x'_k-y)\cdot...\cdot\hat{\psi}(x'_1-y)\bar{\Phi}_n\left(y+\frac{\hat{x}}{M+N}\right)|\Omega_m\rangle \ .\end{aligned} \tag{61}$$

Należy jednak pamiętać, że złożoność obliczeniowa tego wyrażenia rośnie szybko wraz ze wzrostem liczby $k$.

## 6.2 Dynamika

W mojej rozprawie ograniczyłem się do analizy stanów własnych układu. Jednakże zaprezentowana tu uogólniona transformacja LLP może zostać użyta również przy analizie dynamiki stanów niestacjonarnych. W ogólności każdy stan kwantowy może być zapisany jako superpozycja stanów z rozseparowanym ruchem środka masy i ruchem względnym, $\sum_{nm} A_{nm}\Psi_n(y)\,|\Xi_m\rangle$. W tym podrozdziale skoncenturuję się jednak na najprostrzym przypadku, w którym stan początkowy układu może być zapisany jako pojedynczy człon tej sumy $\Psi(y)\,|\Xi\rangle$. Korzystając z tego, że hamiltonian układu separuje się, energia dla takiego stanu wynosi:

$$E = \int dy\ \Psi^*(y)H_{CM}[y,\partial_y]\Psi(y) + \langle\Xi|\,\hat{H}_{rel}\,|\Xi\rangle \ . \tag{62}$$

Profile gęstosci jak i wyższe funkcje korelacji również mogą być wyznaczone dla takiego stanu. Wystarczy podstawić $\Psi(y)\,|\Xi\rangle$ do wzorów w podrozdziałach (5.2) oraz (6.1).

Zapisanie dowolnego stanu z separowalnym środkiem masy w odpowiedniej bazie w ogólności nie jest prostym zadaniem. Istnieje jednak specjalna klasa stanów kwantowych, dla których można to zrobić używając narzędzi przedstawionych w poprzednich rozdziałach. Jeżeli dany stan kwantowy jest niskoenergetycznym wektorem własnym jakiegoś hamiltonianu z separowalnym środkiem masy, może on zostać znaleziony poprzez częściową diagonalizację tego hamiltonianu. Aby zapisać dowolny operator w odpowiedniej bazie Focka wystarczy

obliczyć wyrażenia

$$\langle M|\,\hat{O}_1\,|N\rangle = \sum_{nm} \langle M|\,\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m\,|N\rangle \int dx\ \phi_n^*(x) O_1(x) \phi_m(x)\ , \tag{63}$$

$$\langle M|\,\hat{O}_2\,|N\rangle = \sum_{nmlk} \langle M|\,\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k\,|N\rangle \int dx \int dx' \phi_n^*(x) \phi_m^*(x') O_2(x,x') \phi_k(x') \phi_l(x)\ , \tag{64}$$

odpowiednio dla operatora jednocząstkowego i dwuczastkowego. W związku z tym zapisanie dowolnego hamiltonianu w danej bazie nie jest problemem. Takie podejście do tworzenia stanu początkowego układu nie różni się szczególnie od tego jak niestacjonarne stany mogą być tworzone w doświadczeniach. W eksperymentach z ultrazimnymi atomami badacze mogą gwałtownie zmienić siłę oddziaływań międzycząstkowych używając rezonansu Feshbacha, bądź kształt potencjału pułapkującego manipulując własnościami wiązek laserowych. W wyniku tego układ, który by w stanie podstawowym jednego hamiltonianu zaczyna ewoluować zgodnie z innym hamiltonianem.

Poza stanem kwantowym w chwili początkowej, potrzebne jest również narzędzie, które pozwoli ewoluować ten stan w czasie. Po pierwsze należy zauważyć, że skoro zarówno stan początkowy jak i hamiltonian układu mają separowalny środek masy, części stanu kwantowego opisująca ruch środka masy i ruch względny będą ewoluowały od siebie niezależnie. Ruch środka masy jest problemem jednocząstkowym. Aby znać ewolucje ruchu środka masy w dowolnej chwili czasu wystarczy rozłożyć stan początkowy na stany własne, które są znane analitycznie. Jeżeli w chwili początkowej funkcja falowa ruchu środka masy ma postać $\Psi(y,0) = \sum_n a_n \Phi_n(y)$, to po czasie $t$ będzie wynosiła $\Psi(y,t) = \sum_n a_n \Phi_n(y) e^{-iE_n t}$.

Wektora ruchu względnego nie da się ewoluować analitycznie i trzeba zastosować jakąś metodę numeryczną. Przykładowo, można to być algorytm Runge-Kutty czwartego rzędu [87]. W tej metodzie, wektor stanu ewoluuje się krok po kroku z przerwą czasową $\delta t$ pomiędzy krokami. Dla wektora, który w chwili $t$ ma postać $|\Xi(t)\rangle$, w następnym kroku będzie wynosić:

$$|\Xi(t+\delta t)\rangle = |\Xi(t)\rangle + \frac{\delta t}{6}\left[|V_1\rangle + 2\,|V_2\rangle + 2\,|V_3\rangle + |V_4\rangle\right] \tag{65a}$$

$$|V_1\rangle = -i\hat{H}_{rel}\,|\Xi(t)\rangle \tag{65b}$$

$$|V_2\rangle = -i\hat{H}_{rel}\left(|\Xi(t)\rangle + \frac{\delta t}{2}\,|V_1\rangle\right) \tag{65c}$$

$$|V_3\rangle = -i\hat{H}_{rel}\left(|\Xi(t)\rangle + \frac{\delta t}{2}\,|V_2\rangle\right) \tag{65d}$$

$$|V_4\rangle = -i\hat{H}_{rel}\left(|\Xi(t)\rangle + \delta t\,|V_3\rangle\right) \tag{65e}$$

Dokładność metody zależy od tego jak mały jest krok $\delta t$. Dla dowolnej chwili czasu można

obliczyć te same wielkości fizyczne co dla stanu początkowego. Podsumowując prezentowane w tej pracy uogólnienie transformacji LLP może mieć szerokie zastosowanie przy analizie ewolucji układów niestacjonarnych.

## 6.3 Podsumowanie

W mojej rozprawie doktorskiej dokonałem analizy układu kilku fermionów oddziałujących kontaktowo z pojedynczą niejednorodnością w jednowymiarowej pułapce harmonicznej (tzw. problem małego polaronu fermionowego). Do tego celu zformułowałem i wykorzystałem transformację kanoniczną będącą uogólnieniem transformacji Lee-Low-Pin. W wyniku tej transformacji hamiltonian układu uległ separacji na hamiltonian ruchu środka masy, który ma ścisłe rozwiązanie oraz hamiltonian ruchu względnego, którego dalsza analiza została przeprowadzona z użyciem metody ścisłej diagonalizacji. Prezentowana metoda została porównana do standardowej metody ścisłej diagonalizacji, która jest typowym podejściem przy analizie układów tego rodzaju. W porównaniu sprawdzone zostało jak szybko otrzymywane stany własne zbiegają do swoich prawdziwych wartości w funkcji parametru obcięcia, co jest miarą skuteczności tych metod. Okazało się, że uogólniona transformacja LLP o wiele lepiej sprawdza się w reżimie silnych oddziaływań międzyskładnikowych jak również w reżimie ciężkiej niejednorodności. Jednocześnie, nawet w przypadku średniej siły oddziaływań i równych mas, prezentowana metoda wypada lepiej. Spowodowane jest to tym, że efektywne oddziaływania w hamiltonianie ruchu względnego są odwrotnie proporcjonalne do masy niejednorodności. Z kolei oddziaływanie kontaktowe w wyniku transformacji staje się efektywnym potencjałem jednocząstkowym. To porównanie nie uwzględniało dodatkowej przewagi proponowanej metody, wynikającej z tego, że jeden ze stopni swobody (związany z ruchem środka masy) jest odseparowany i ma rozwiązanie analityczne. Sprawia to, że analizowany numerycznie hamiltonian ma jedną cząstkę mniej. W konsekwencji rozmiar hamiltonianu ruchu względnego w reprezentacji macierzowej jest wielokrotnie mniejszy nawet dla tej samej wartości obcięcia. Podsumowując, prezentowana metoda okazała się mieć znaczną przewagę nad typowym podejściem przy analizie układu z ciężką niejednorodności oraz silnymi oddziaływaniami.

W pracy przeanalizowałem też jakie wielkości fizyczne mogą zostać w sposób wydajny obliczone z użyciem tej metody. Jasnym jest, że znalezienie energii stanów własnych nie stanowi problemu, ponieważ prezentowana transformacja jest unitarna. Na przykładzie energii pokazałem, że uogólniona transformacja LLP jest nie tylko narzędziem do upraszczania obliczeń numerycznych, ale pozwala też na lepsze zrozumienie fenomenologicznych własności układu. Trudności natomiast przysparza wyznaczenie profili gęstości jednocząstkowych. To zadanie

wymaga przeprowadzenia transformacji odwrotnej. Jest to zawsze możliwe dla transformacji unitarnych, jednak może się wiązać z dużą złożonością obliczeniową. W rozprawie została przedstawiona metoda pozwalająca względnie wydajnie wykonać taką transformację i tym samym znaleźć interesujące nas profile gęstości. Całościowo, uogólniona transformacja LLP okazała się skutecznym narzędziem przy analizie problemu małego polaronu fermionowego.

# Literatura


[1] D. Włodzyński, Phys. Rev. A **106**, 033306 (2022).

[2] S. N. Bose, Zeitschrift für Physik **26**, 178 (1924).

[3] P. A. M. Dirac and R. H. Fowler, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **112**, 661 (1926).

[4] E. Fermi, Rend. Lincei **3**, 145 (1926).

[5] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. **3**, 14 (1925).

[6] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2 ed. (Cambridge University Press, 2008).

[7] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin, Phys. Rev. Lett. **55**, 48 (1985).

[8] P. D. Lett *et al.*, Phys. Rev. Lett. **61**, 169 (1988).

[9] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, J. Opt. Soc. Am. B **6**, 2023 (1989).

[10] W. D. Phillips and H. Metcalf, Phys. Rev. Lett. **48**, 596 (1982).

[11] A. L. Migdall, J. V. Prodan, W. D. Phillips, T. H. Bergeman, and H. J. Metcalf, Phys. Rev. Lett. **54**, 2596 (1985).

[12] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).

[13] K. B. Davis *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[14] B. DeMarco and D. S. Jin, Science **285**, 1703 (1999).

[15] S. Chu, J. E. Bjorkholm, A. Ashkin, and A. Cable, Phys. Rev. Lett. **57**, 314 (1986).

[16] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, Nature Physics **8**, 267 (2012).

[17] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems* (Oxford University Press, 2012).

[18] A. Görlitz *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).

[19] S. De Groot, G. J. Hooyman, C. A. Ten Seldam, and E. A. Guggenheim, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **203**, 266 (1950).

[20] W. Ketterle and N. J. van Druten, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).

[21] L. Chomaz *et al.*, Reports on Progress in Physics **86**, 026401 (2022).

[22] L. G. Marcassa and J. P. Shaffer, Chapter two - interactions in ultracold rydberg gases, , Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics Vol. 63, pp. 47–133, Academic Press, 2014.

[23] M. Olshanii, Phys. Rev. Lett. **81**, 938 (1998).

[24] E. Wille *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 053201 (2008).

[25] C. A. Stan, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **93**, 143001 (2004).

[26] S.-K. Tung *et al.*, Phys. Rev. A **87**, 010702 (2013).

[27] L. Tanzi *et al.*, Phys. Rev. A **98**, 062712 (2018).

[28] S. B. Papp and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **97**, 180404 (2006).

[29] Z.-H. Luo, W. Pang, B. Liu, Y.-Y. Li, and B. A. Malomed, Frontiers of Physics **16**, 32201 (2020).

[30] J. Kinast, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, A. Turlapov, and J. E. Thomas, Phys. Rev. Lett. **92**, 150402 (2004).

[31] C. H. Schunck *et al.*, Phys. Rev. A **71**, 045601 (2005).

[32] C. A. Regal and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **90**, 230404 (2003).

[33] C. Gross and I. Bloch, Science **357**, 995 (2017).

[34] T. Bourdel *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 050401 (2004).

[35] J. J. Kinnunen, J. E. Baarsma, J.-P. Martikainen, and P. Törmä, Reports on Progress in Physics **81**, 046401 (2018).

[36] G. Orso, Phys. Rev. Lett. **98**, 070402 (2007).

[37] F. Serwane *et al.*, Science **332**, 336 (2011).

[38] G. Zürn *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 075303 (2012).

[39] A. N. Wenz *et al.*, Science **342**, 457 (2013).

[40] D. Blume, Reports on Progress in Physics **75**, 046401 (2012).

[41] N. T. Zinner, Exploring the few-to many-body crossover using cold atoms in one dimension, in *EPJ Web of Conferences* Vol. 113, p. 01002, EDP Sciences, 2016.

[42] T. Sowiński and M. Ángel García-March, Reports on Progress in Physics **82**, 104401 (2019).

[43] S. I. Mistakidis *et al.*, Cold atoms in low dimensions – a laboratory for quantum dynamics, 2022, arXiv:2202.11071.

[44] G. Grosso and G. P. Parravicini, Xvi - magnetic properties of localized systems and kondo impurities, in *Solid State Physics*, pp. 586–618, Academic Press, London, 2000.

[45] P. Massignan, M. Zaccanti, and G. M. Bruun, Reports on Progress in Physics **77**, 034401 (2014).

[46] M. Koschorreck *et al.*, Nature **485**, 619 (2012).

[47] A. Schirotzek, C.-H. Wu, A. Sommer, and M. W. Zwierlein, Phys. Rev. Lett. **102**, 230402 (2009).

[48] C. Kohstall *et al.*, Nature **485**, 615 (2012).

[49] J. Levinsen, P. Massignan, G. M. Bruun, and M. M. Parish, Science Advances **1**, e1500197 (2015).

[50] T. Graß, Phys. Rev. A **92**, 023634 (2015).

[51] S. E. Gharashi, X. Y. Yin, Y. Yan, and D. Blume, Phys. Rev. A **91**, 013620 (2015).

[52] G. E. Astrakharchik and I. Brouzos, Phys. Rev. A **88**, 021602 (2013).

[53] N. J. S. Loft, L. B. Kristensen, A. E. Thomsen, and N. T. Zinner, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **49**, 125305 (2016).

[54] C. W. Duncan, F. F. Bellotti, P. Öhberg, N. T. Zinner, and M. Valiente, New Journal of Physics **19**, 075001 (2017).

[55] M. Tylutki, G. E. Astrakharchik, and A. Recati, Phys. Rev. A **96**, 063603 (2017).

[56] E. V. H. Doggen, A. Korolyuk, P. Törmä, and J. J. Kinnunen, Phys. Rev. A **89**, 053621 (2014).

[57] S. I. Mistakidis, G. C. Katsimiga, G. M. Koutentakis, and P. Schmelcher, New Journal of Physics **21**, 043032 (2019).

[58] J. Kwasniok, S. I. Mistakidis, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **101**, 053619 (2020).

[59] N. P. Mehta, Phys. Rev. A **89**, 052706 (2014).

[60] A. Tononi, J. Givois, and D. S. Petrov, Phys. Rev. A **106**, L011302 (2022).

[61] J. B. Aviles, Annals of Physics **50**, 393 (1968).

[62] M. A. García-March, B. Juliá-Díaz, G. E. Astrakharchik, J. Boronat, and A. Polls, Phys. Rev. A **90**, 063605 (2014).

[63] N. J. S. Loft, A. S. Dehkharghani, N. P. Mehta, A. G. Volosniev, and N. T. Zinner, The European Physical Journal D **69**, 65 (2015).

[64] A. S. Dehkharghani, A. G. Volosniev, and N. T. Zinner, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **49**, 085301 (2016).

[65] M. D. Girardeau, Phys. Rev. A **28**, 3635 (1983).

[66] T. D. Lee, F. E. Low, and D. Pines, Phys. Rev. **90**, 297 (1953).

[67] M. D. Girardeau and A. Minguzzi, Phys. Rev. A **79**, 033610 (2009).

[68] B. Kain and H. Y. Ling, Phys. Rev. A **96**, 033627 (2017).

[69] T. Busch, B.-G. Englert, K. Rzażewski, and M. Wilkens, Foundations of Physics **28**, 549 (1998).

[70] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover, 1964).

[71] B. Hall, The baker–campbell–hausdorff formula and its consequences, in *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction*, pp. 109–137, Springer, 2015.

[72] H. Lin, J. Gubernatis, H. Gould, and J. Tobochnik, Computers in Physics **7**, 400 (1993).

[73] A. Weiße and H. Fehske, *Exact Diagonalization Techniques* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008), pp. 529–544.

[74] F. Deuretzbacher, K. Bongs, K. Sengstock, and D. Pfannkuche, Phys. Rev. A **75**, 013614 (2007).

[75] M. A. Garcia-March and T. Busch, Phys. Rev. A **87**, 063633 (2013).

[76] M. A. García-March *et al.*, New Journal of Physics **16**, 103004 (2014).

[77] D. Pęcak, A. S. Dehkharghani, N. T. Zinner, and T. Sowiński, Phys. Rev. A **95**, 053632 (2017).

[78] D. K. Nandy and T. Sowiński, New Journal of Physics **22**, 053043 (2020).

[79] T. Haugset and H. Haugerud, Physical Review A **57**, 3809 (1998).

[80] D. C. Sorensen, *Implicitly Restarted Arnoldi/Lanczos Methods for Large Scale Eigenvalue Calculations* (Springer Netherlands, Dordrecht, 1997), pp. 119–165.

[81] G. W. Stewart, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications **23**, 601 (2002).

[82] G. L. G. Sleijpen and H. A. V. der Vorst, SIAM Review **42**, 267 (2000).

[83] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* (Cambridge University Press, 2010).

[84] D. Pęcak, M. Gajda, and T. Sowiński, Few-Body Systems **58**, 159 (2017).

[85] M. Girardeau, Journal of Mathematical Physics **1**, 516 (1960).

[86] D. Pęcak, M. Gajda, and T. Sowiński, New Journal of Physics **18**, 013030 (2016).

[87] K. Atkinson, *An introduction to numerical analysis* (John wiley & sons, 1991).