Domača naloga iz statistične fizike: Supertekočnost hardcore bozonov

Marko Medenjak

2013

Uvod

Za natančnejšo formulacijo problema in razlago nekaterih vmesnih korakov glej točko 5.7.7 v [1]. Prav tako je dobršen del naloge povzet po prej omenjeni nalogi. Posamezne točke ustrezajo podnalogam problema 5.7.7. Članek [3] vsebuje poleg obravnave problema v MFA tudi obravnavo spinskih ekscitacij in numerično obravnavo problema.

1 Problem

Imamo kvadratno mrežo. Na posameznem mestu se nahaja kvečjemu 1 bozon (hardcore). Velekanonični potencial, ki je funkcija, ki karakterizira velekanonično porazdelitev velja je [2]

$$J = U - TS - \mu N.$$

Z J bomo označevali velekanonični potencial. Obravnavali bomo sistem pri $T = 0$. Hamiltonjan, ki opisuje interakcijo med bozoni je

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j - \mu \sum_i a_i^\dagger a_i.$$

Prvi člen je kinetična energija-notranja energija sistema. Dodajmo še komentar h MFA pristopu v našem primeru. MFA pristop je ekvivalenten variacijski metodi. Ker smo izbrali sistem pri temperaturi T=0, lahko namesto s poskusnim hamiltonjanom [1] operiramo kar z izbranimi stanji, ki so odvisni od nekega parametra. Tukaj gre za iskanje približka osnovnega stanja.

K reševanju problema bomo pristopili tako, da bomo najprej izračunali velekanonični potencial za primer variacijsko izbranega stanja brez toka. Nato bomo stanje spremenili tako, da bo v sistemu prisoten tok. Iz razlike energij obeh stanj bomo nato določili gostoto superfluidinih bozonov v drugem primeru. Sproti bomo izračunali še vrednosti nekaterih zanimivih opazljivk.

[1]Za definicijo in splošnejšo izpeljavo glej poglavje 4.2 v [1]

2 Rešitev

Bozonski operatorji poleg standardni komutacijski relaciji za operatorje, ki se ne tičejo istega mesta, zadoščajo tudi antikomutacijski relaciji

$$\{a_i^\dagger, a_i\} = 1,\ \{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} = 0,\ \{a_i, a_i\} = 0,$$

kar je posledica tega, da so naši bozoni trde kroglice in se na posameznem mestu obnašajo kot fermioni.

Operatorje lahko preslikamo na spinske operatorje z naslednjo transformacijo

$$a_i = S_i^-.$$

Od tu sledi

$$a_i^\dagger = S_i^+,$$

$$a_i^\dagger a_i = S_i^z + 1/2.$$

Pokažimo, da taka definicija zadošča ustreznim algebrskim identitetam. Za operatorje, ki netrivialno delujejo na različna mesta je to očitno, tako da nam ostane le še

$$[S_i^-, S_i^+] = [a_i, a_i^+] = 1 - 2a_i^+ a_i = -2S_i^z.$$

Na drugem koraku smo uporabili antikomutacijsko zvezo. Ker dana preslikava zadošča zgornji komutativni zvezi in ker vsak operator komutira z identiteto, je očitno da veljajo tudi ustrezne komutativne zveze med zgornjima ter S_i^z operatorjem.

1.) Hamiltonjan po transformaciji je naslednje oblike

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} S_j^\dagger S_i - \frac{\mu}{2} \sum_i S_i^z + h.c. + \frac{\mu N}{2}.$$

Dobili smo XX-model v zunanjem magnetnem polju vzdolž z-osi.

Poglejmo, kaj po dani transformaciji pomenijo različna stanja. Zavoljo enoličnosti z [1] označimo stanje z l.v. -1, glede na operator S^z z $|-\rangle$ in z $|+\rangle$ stanje z lastno vrednostjo $+1$.

2.) Stanje brez bozonov je $|0\rangle = \Pi_i |-\rangle_i$

$$(S_i^z + \frac{1}{2})\Pi_j |-\rangle_j = (-\frac{1}{2} + \frac{1}{2})\Pi_j |-\rangle_j = 0.$$

$$\sum_i (S_i^z + \frac{1}{2})\Pi_j |-\rangle_j = 0.$$

Stanje $|-\rangle_j$ torej ustreza stanju, ko na j-tem mestu ni delca. Stanje $|+\rangle_j$ ustreza zapolnjenemu stanju na j-tem mestu.

3.) Stanje, ki ga bomo uporabili za MFA je stanje kjer se vsi spini nagnjeni za enak kot glede na os z. V takem stanju je verjetnost, da je posamezno mesto zapolnjeno neodvisno od mesta. Tako stanje lahko zapišemo kot

$$|\psi\rangle = \Pi_i (\sin\frac{\theta}{2}\exp(-i\frac{\phi_i}{2})|-\rangle_i - \cos\frac{\theta}{2}\exp(i\frac{\phi_i}{2})|+\rangle_i).$$

Gostota delcev je $\rho = \frac{\sum_i n_i}{N}$, kjer je N število vseh mest in torej maksimalno število delcev. Izrazimo gostoto delcev v zgornjem stanju s pomočjo parametra θ. Pričakovana vrednost števila delcev je

$$\langle\sum_i n_i\rangle = \sum_i \langle\psi|S_i^+ S_i^-|\psi\rangle = N\cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{N}{2}\left(\cos\theta + 1\right),$$

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\cos\theta + 1\right)$$

$$\cos\theta = 2(\rho - \frac{1}{2})$$

Vzemimo sedaj, da je $\phi_i = 0$. V tem primeru vsi spini kažejo v isto smer.

4.) Poglejmo kolikšnja je gostota kondenziranih bozonov v MFA stanju. Bozoni so kondenzirani, če je njihova gibalna količina 0. Izračunajmo število bozonov v stanju k=0. Najprej napravimo fourierovo transformacijo operatorjev

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j \exp(-\frac{i\vec{k}\vec{j}2\pi}{L})a_{\vec{j}}, \tag{1}$$

nakar lahko izračunamo koliko delcev ima v izbranem stanju gibalno količino 0

$$N_0 = \langle\psi|b_0^\dagger b_0|\psi\rangle.$$

L je število mest vzdolž 1 dimenziji, vektor k je pa je 2 dimenzionalno celo število, ki je omejeno s številom delcev.

V enačbo (1) vstavimo $k = 0$ in rezultat vstavimo v zgornjo enačbo

$$N_0 = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\langle\psi|a_i^\dagger a_j|\psi\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\langle\psi|S_i^\dagger S_j|\psi\rangle = \rho + \frac{1}{N}\sum_{i\neq j}\langle\psi|S_i^\dagger S_j|\psi\rangle = \rho + \frac{1}{N}N(N-1)(\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2})^2 =$$

$$= \rho + \frac{(N-1)}{4}\sin^2\theta = \rho + \frac{(N-1)}{4}\sin^2\theta = \rho + \frac{(N-1)}{4}(1 - 4(\rho^2 - \rho + \frac{1}{4})) = \rho + (N-1)(-\rho^2 + \rho) = N(\rho - \rho^2) + \rho^2$$

Za velik N dobimo

$$\rho_0 = \rho(1-\rho). \tag{2}$$

Če je gostota delcev dovolj majhna, hardcore potencial ne vpliva na gostoto kondenziranih delcev, saj je verjetnost, da se dva delca srečata majhna.

Limitni primer za drugo skrajnost ne velja le za izbrano variacijsko stanje, ampak je posledical algeberske strukture. Natančnejši vpogled dobimo, če pogledamo kakšne algebralske zveze veljajo med transformiranimi operatorji

$$2b_0^\dagger b_0^\dagger = \{b_0^\dagger, b_0^\dagger\} = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 + \frac{1}{N}\sum_{i\neq j}\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \frac{1}{N}\sum_{i\neq j}[a_i^\dagger, a_j^\dagger] + 2a_j^\dagger a_i^\dagger = \frac{1}{N}\sum_{i\neq j} 2a_j^\dagger a_i^\dagger$$

Začetek zgornje vrstice je analogen primeru, ko poskušamo v stanju $k = 0$ ustvariti 2 delca. Zadnji del je zelo majhen, če je že veliko mest zasedenih. V tem primeru torej ne moreta biti dva bozona kondenzirana in je posledično v termodinamski limiti gostota kondenziranih bozonov 0. (2) je najpreprosterjša funkcija, ki zadošča prej omenjenima robnima primeroma.

5.) Vpeljimo na tem mestu ureditveni parameter, ki je $\langle a_i \rangle$. Da gre res za ureditveni parameter, je razvidno iz naslednjega računa

$$|\langle\psi|\frac{1}{N}\sum_i a_i|\psi\rangle| = |\langle\psi|\frac{1}{N}\sum_i S_i|\psi\rangle| = \frac{\sin\theta}{2N}|\sum_i \exp(i\phi_i)|.$$

Če so vsi koti ϕ_i enaki, je ureditveni parameter maksimalen. V primeru, ko pa je ϕ_i enakomerno porazdeljen po intervalu $[0, 2\pi)$, pa je ureditveni parameter 0. Sistem naj se nahaja v maksimalno urejenem stanju

$$\langle\frac{1}{N}\sum_i a_i\rangle = \frac{\sin\theta}{2} = \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4(\rho - \frac{1}{2})^2} = \sqrt{\rho - \rho^2} = \sqrt{\rho_0}.$$

Vidimo, da je ureditveni parameter tesno povezan z deležem kondenziranih delcev.

6.) Zanima nas pričakovana vrednost velekanoničnega potenciala v izbranem MFA stanju

$$J = \langle\psi|H|\psi\rangle = -\mu\langle\sum_i n_i\rangle - t\sum_{\langle i,j\rangle}\langle\psi|a_i^\dagger a_j|\psi\rangle =$$

$$= -\frac{N\mu}{2}(\cos\theta + 1) - tN4(\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2})^2 = -\frac{N\mu}{2}(\cos\theta + 1) - tN4(\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2})^2$$

$$= -\frac{N\mu}{2}(\cos\theta + 1) - tN\sin^2\theta$$

7.) Kot θ dobimo z minimizacijo velekanoničnega potenciala

$$\frac{N\mu}{2}\sin\theta = 2tN\sin\theta\cos\theta,$$

$$\cos\theta = \frac{\mu}{4t}.$$

$$\rho = \frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{4t}+1\right);\; J = -\frac{N\mu}{2}\left(\frac{\mu}{4t}+1\right) - tN\left(1-\left(\frac{\mu}{4t}\right)^2\right);\; \rho_0 = \frac{1}{4}\left(1-\left(\frac{\mu}{4t}\right)^2\right)$$

8.) Pričakovana vrednost gibalne količine je

$$p = \langle\psi| - i\nabla|\psi\rangle.$$

Očitno je, da θ ne prispeva ničesar, saj je konstantna, tako da nam preostane le še ϕ. Ker imamo periodične robne pogoje, velja da mora biti spremeba faze, ko prehodimo celotno mrežo enak večkratniku 2π

$$\sum_i D_i(\phi) = 2\pi n,\; n\epsilon\mathbb{Z}.$$

D_i označuje diskretno divergenco. Stanje, ki zadosti zgornjemu pogoju je

$$|\psi\rangle_T = \Pi_i \exp\left(i\phi_i\right)\left(\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle_i - \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle_i\right),$$

pri čemer linearno povečujemo ϕ_i vzdolž koordinate x in se ko pridemo do konca spremeni za 2π in je torej $\Delta\phi = \frac{2\pi}{L}$. Vzdolž y-koordinate je kot konstanten.
Izračunajmo J za primer zgornje valovne funkcije.

$$J_T = \langle\psi|H|\psi\rangle = -\mu\langle\sum_i n_i\rangle - t\sum_{\langle i,j\rangle}\langle\psi|a_i^\dagger a_j|\psi\rangle = -\frac{N\mu}{2}\left(\cos\theta+1\right) - \frac{tN}{2}(1+\cos\Delta\phi)\sin^2\theta$$

Edina razlika od računa v nalogi 7. je da pri drugem členu, ko gledamo najbližje sosede vzdolž x-smeri dobimo razliko kotov. Za vsakeg naslednjega soseda imamo seveda prejšnjega, kar nam da kosinusno funkcijo razlike ϕ-ja. V y-smeri ni nobenih razlik. V minimumu dobimo za θ

$$\cos\theta = \frac{\mu}{2(1+\cos\Delta\phi)t}.$$

9.) Razlika energij je enaka kinetični energiji supertekočine to nam omogoča izračun gostote superfluidnih delcev ρ_s, ki je podana

$$\frac{\Delta J}{N} = \frac{\rho_S m v^2}{2},\; v = \frac{\Delta\phi}{m},\; t = \frac{1}{2m};$$

Izraz za hitrost dobimo iz lokalne divergence

$$p = mv,\; p = \langle\psi|_T(-i\nabla)|\psi\rangle_T = -i\langle\psi|_T(|\psi+1\rangle_T - |\psi\rangle_T) = -i\left(\exp(i\Delta\phi)-1\right) \sim \Delta\phi.$$

$|\psi+1\rangle$ označuje premik enega kota za eno mesto. Premikamo le en kot, ker smo vzeli pri definiciji gibalne količine le 1 delec. Če bi vzeli vse, bi premaknili vse kote, pri čemer bi bil izraz za hitrost seveda enak. Sprememba kota je majhna za dolge verige, tako da lahko izraz razvijemo

$$\theta \sim \arccos(\frac{\mu}{4t}\left(1+\frac{\Delta\phi^2}{4}\right)).$$

$$J_T = -\frac{N\mu}{2} + N\frac{\mu^2}{8t}\left(1+\frac{\Delta\phi^2}{4}\right) - tN(1-\frac{\Delta\phi^2}{4})\{1-[\frac{\mu}{4t}\left(1+\frac{\Delta\phi^2}{4}\right)]^2\}$$

$$\Delta J = tN\frac{\Delta\phi^2}{4}\left(1-\left(\frac{\mu}{4t}\right)^2\right)$$

$$\rho_S = \frac{2\Delta J}{N\Delta\phi^2}m = \frac{1}{4}\left(1-\left(\frac{\mu}{4t}\right)^2\right) = \rho_0$$

10.) Opazimo lahko, da je gostota superfluidnih delcev natanko enaka gostoti kondenziranih delcev. Pričakovali bi, da se gostota superprevodnih delcev zmanjša če vključimo v obravnavo spinske velove, saj kvazidelci navadno prinesejo disipacijo, vendar se izkaže, da se ρ_S v tem primeru poveča [3].

References

[1] M. Le Bellac, F. Mortessagne in G. G. Bartrouni,Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics, (Cambridge, 2010).

[2] http://en.wikipedia.org/wiki/Grand_potential

[3] K. Bernardet, G. G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, and A. Dorneich, Physical Review B 65, 104519.