

Academiejaar
2023 - 2024

Padintegraalbehandeling van een geladen onzuiverheid in een tweedimensionaal Bose gas

Nathalie Van Dyck

Proefschrift ingediend tot het behalen van de graad van Master in de Fysica
Departement Fysica

Promotor
prof. dr. Jacques Tempere, UAntwerpen



Universiteit Antwerpen
| **Faculteit Wetenschappen**

Inhoudsopgave

1	Inleiding	3
1.1	Fröhlich polaron als blauwdruk	3
1.2	Vrij Bose gas in twee dimensies	6
1.3	Experimentele opstelling	8
1.4	Interagerend Bose gas	9
1.5	Tweedimensionaal geladen Bose polaron	11
2	Het polaron na Bogoliubov transformatie	14
2.1	Condensaat versus excitaties	14
2.2	Bogoliubov transformatie	15
2.3	Polaronische koppelingssterkte	17
3	Variationele Feynman padintegraal methode	18
3.1	Actie van het Bose polaron	21
3.2	Polaron energie en het modelsysteem	22
3.3	Terug naar Jensen-Feynman voor de polaron energie	25
3.4	Jensen-Feynman in de ultra-koude limiet	26
3.5	Jensen-Feynman in dimensieloze eenheden	28
3.6	Rubidium ion $^{87}\text{Rb}^+$ in een Rubidium ^{87}Rb condensaat	30
4	Berekenen van de polaron massa, straal en energie	32
4.1	Polaron energie	32
4.2	Polaron massa	33
4.3	Polaron straal	33
5	Besluit	42

ABSTRACT NEDERLANDS

Padintegraalbehandeling van een geladen onzuiverheid in een tweedimensionaal Bose gas

Nathalie Van Dyck

Een geladen onzuiverheid in een interagerend Bose gas heeft interesse opgewekt door het lange afstandskarakter van de koppeling. De variationele Feynman padintegraal methode heeft voor gelijkaardige polaron effecten al accurate resultaten opgeleverd. De resultaten in de regio van sterke koppeling vertonen echter discrepanties met de theorie. Het is in dit regime dat het polaron quasi-deeltje lokaliseert in het medium.

De meeste papers bestuderen een neutrale onzuiverheid in een driedimensionaal Bose gas zodat de interactie potentiaal als contact potentiaal benaderd kan worden. Maar hierdoor valt juist het lange afstandskarakter buiten beschouwing. Een lading toewijzen aan de onzuiverheid zorgt echter voor een sterke depletie in het condensaat wanneer deze lokaliseert. Een dimensiereductie is waardevol doordat polaronische effecten verhogen. Het polaron komt hierdoor in het sterke koppelingsregime terecht zonder zijn afbeelding op de Fröhlich Hamiltoniaan te verliezen.

Een voordeel van Bose gassen te kiezen als medium is dat het gebruik van Feshbach resonantie de interactie-amplitudes varieert. Experimenteel kan hierdoor het gedrag van het polaron over de koppelingsregimes bekeken worden. Het berekenen van de polaron energie volgens de Feynman padintegraal methode is daarom geschikt doordat de oplossing geldig is ongeacht het regime waarin het polaron zich bevindt. Hierbij wordt de aanname gemaakt dat de Bogoliubov benadering opgaat, waar de bijdrage van de grondtoestand macroscopisch groot is.

In deze thesis bestuderen we de effecten van een lange-afstands interactiepotentiaal alsook dimensiereductie op de koppelingsregimes van een polaron. We doen dit door eigenschappen van het polaron te bekijken wiens gedrag kenmerkend verandert over de koppelingsregimes. We gebruiken hiervoor een Bose polaron dat vormt uit een Rubidium ion dat koppelt met een quasi-tweedimensionaal condensaat van interagerende Rubidium atomen.

Concreet benaderen we de energie van het geladen Bose polaron in twee dimensies op een variationele manier volgens de Feynman padintegraal methode. We beginnen met de Hamiltoniaan op te stellen en hanteren de Bogoliubov transformatie om deze af te beelden op de Fröhlich Hamiltoniaan die historisch werd gebruikt als blauwdruk. Het is deze transformatie die de focus verlegt naar een ideaal gas van Bogoliubov excitaties in interactie met de onzuiverheid. Dit biedt tevens de verantwoording om de Feynman padintegraal methode te gebruiken.

We gebruiken een variationele model-actie die de bovengrens oplevert voor de vrije energie in de ultra-koude limiet. Dit resultaat wordt geminimaliseerd in functie van de variationele parameters. Daarnaast wordt de straal benaderd die de lokale depletie geeft in het condensaat vanwege het koppelen met de condensaatvorming. Tenslotte berekenen we een toename in massa, die wordt meegenomen in de effectieve polaron massa. We onderscheiden het zwakke en sterke koppelingsregime door het gedrag van de polaronische energie, massa en straal te onderzoeken.

ENGLISH ABSTRACT

Path-integral treatment of a charged impurity in a two-dimensional Bose gas

Nathalie Van Dyck

A charged impurity in an interacting Bose gas has gained interest due to the long-range nature of the coupling. The variational Feynman path integral method has already yielded accurate results for similar polaron effects. However, the results in the region of strong coupling show discrepancies with the theory. In this regime, the polaron quasi-particle localizes in the medium.

Most papers focus on a neutral impurity in a three-dimensional Bose gas with the interaction potential approximated as a contact potential. Consequently, the long-range nature gets ignored in the calculations. Assigning a charge to the impurity causes a strong depletion in the condensate where localisation occurs. A dimension reduction is valuable as it gives rise to an increase in polaronic effects. This moves the polaron into the strong coupling regime without losing its mapping to the Fröhlich Hamiltonian.

We opt for a Bose gas as medium since the interaction amplitudes vary by use of Feshbach resonance. Experimentally, this allows for the polaron behavior to be examined over the coupling regimes. Calculating the polaron energy by using the Feynman path integral method is therefore suitable considering the validity across all coupling regimes. This holds under the assumption of the Bogoliubov approximation to be accurate, in which case the ground state contributes macroscopically to the condensate.

In this thesis, we study the effects of long-range interaction as well as dimension reduction on the coupling regimes of a polaron. The polaronic properties with distinctive behavior across the coupling regimes are examined. To this end, we employ a Bose polaron emerging from a Rubidium ion coupling to a quasi-two-dimensional condensate of interacting Rubidium atoms.

Specifically, we approximate the energy of the charged Bose polaron in two dimensions in a variational manner using the Feynman path-integral method. We start by setting up the Hamiltonian and proceed with a Bogoliubov transformation that maps onto the Fröhlich Hamiltonian which has been used historically as a blueprint. This transformation shifts the focal point to the ideal gas of Bogoliubov excitations interacting with the impurity. Additionally, this shift allows us to use the Feynman path integral method.

We deploy a variational model-action that yields an upper bound for the free energy in the ultra-cold limit. This result is minimized with respect to the variational parameters. Subsequently, the polaron radius, which is a signifier for the local depletion in the condensate due to coupling to condensate deformation, is approximated. Finally, an increase in mass is determined, which gets included in the effective polaron mass. We distinguish between the coupling regimes by investigating the behavior of the polaronic energy, mass and radius.

1 Inleiding

De vaste stoffysica beschrijft fononen als gevolg van een uitwijking van atomen ten opzichte van hun evenwichtspositie in het rooster. Ze ontstaan bijvoorbeeld wanneer een mobiel elektron in een ionair of polair kristal gebracht wordt. De elektronlading induceert fononen in de vorm van een ladingsverplaatsing en sleept dit effect mee doorheen het rooster. De polarisatie gevormd door het elektron koppelt dan terug volgens een uitgestelde interactie.

Pekar [10] introduceerde in 1946 het elektron samen met haar polarisatiewolk als quasi-deeltje onder de naam *polaron*. De Hamiltoniaan die deze beschrijft werd in 1952 door Fröhlich [9] ontwikkeld - iets dat later veralgemeend werd als het polaron effect. Men noemt het eerder beschreven quasi-deeltje een Fröhlich polaron om dit te onderscheiden van andere types polaronen zoals het acousto-polaron [23], ripplopolaron [25], piëzopolaron [24] en meer recent - het Bose polaron.

In deze thesis beschrijven we hoe een Rubidium ion $^{87}\text{Rb}^+$ in een quasi-tweedimensionaal Rubidium ^{87}Rb condensaat aanleiding geeft tot een geladen Bose polaron in twee dimensies. Een onzuiverheid in een Bose Einstein condensaat is in 2016 spectroscopisch [15] waargenomen van ^{39}K atomen. In [19] werden de eigenschappen van een neutraal BEC-impureteit polaron in drie dimensies bestudeerd via de variationele Feynman-padintegraal methode. Het ad-hoc variationeel principe berekent de polaronische shift in vrije energie voor alle koppelingssterktes, alsook de toename in effectieve massa en de polaron straal. Hierbij wordt de Bogoliubov transformatie gebruikt die de focus verlegt naar een ideaal gas van Bogoliubov excitaties in interactie met de onzuiverheid. Technieken die origineel afgeleid waren voor een ideaal Bose gas zoals de beschreven variationele Feynman padintegraal methode, kunnen zo hergebruikt worden.

In [44] wordt op deze manier de polaron energie, straal en massa berekend voor een neutraal Bose polaron in gereduceerde dimensies. [45] herhaalt deze methode voor een geladen Bose polaron in drie dimensies. In deze thesis zijn we geïnteresseerd in de lange-afstands effecten van een geladen onzuiverheid alsook de invloed van dimensie reductie. Concreet gebruiken we dezelfde variationele Feynman padintegraal methode, toegepast op een geladen Bose polaron in twee dimensies.

De thesis is gestructureerd als volgt. In sectie 1.1 stelt het Fröhlich polaron de lezer aan het algemeen polaron concept voor. Sectie 1.2 introduceert de lezer aan een probleemstelling door het gekende Bose-Einstein condensaat (BEC) in twee dimensies te bekijken. Hieraan wordt een geladen impureteit toegevoegd in sectie 1.5 met polaron effect als resultaat. Door de Bogoliubov benadering in hoofdstuk 2 kunnen we het geladen Bose polaron dan terugkoppelen aan het Fröhlich polaron. Dit geeft ons de verantwoording om dezelfde methodes te gebruiken als voor elk polaron effect dat kan afgebeeld worden op dezelfde Hamiltoniaan. In hoofdstuk 3 lichten we de Jensen-Feynman ongelijkheid toe die ons toelaat in hoofdstuk 4 de energie, massa en straal te benaderen in de ultra-koude limiet.

1.1 Fröhlich polaron als blauwdruk

De vaste stoffysica beschrijft een effect als gevolg van een elektron in te brengen in een rooster. Door de negatieve elektronlading wijken de ionen in het rooster van hun evenwichtspositie. De verplaatsing van alle ionen tesamen bekijken we als een golf die op Fourier manier ontbonden wordt naar de impulsruimte, in oscillaties met verschillend golfgetal $\vec{k}$. Elke oscillatie komt zo overeen met een kwantumtoestand $|\vec{k}\rangle$ en de bijdrage hiervoor aan de samengestelde golf is het bezettingsgetal $n_{\vec{k}}$. Op deze manier wordt de volledige roostertrilling ontbonden in de bezettingsgetallenrepresentatie (zie vergelijking 1.27) waar de bosonische creatie/annihilatie het maken/vernietigen van een fonon voorstelt. Dit principe wordt ter verduidelijking nog herhaald in Figuur 1.1.

De bosonische operatoren volgen dezelfde wiskunde als ladderoperatoren, waardoor de fonon Hamiltoniaan in tweede kwantisatie,

$$\sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}}, \quad (1.1)$$

ook een set onafhankelijke harmonische oscillatoren beschrijft, hier gemeten vanaf de nulpuntsenergie. We krijgen longitudinaal optische (LO) fononen met constante dispersierelatie

$$\omega_{\vec{k}} = \omega_{LO}, \quad (1.2)$$

die een impuls $\vec{k}$ uitwisselen met het elektron via interactiepotentiaal. Deze wordt gegeven door [9]

$$V(\vec{k}) = -i \frac{\hbar \omega_{LO}}{k} \sqrt{\frac{4\pi\alpha_{LO}}{A}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/4}, \quad (1.3)$$

waarin

$$\alpha_{LO} = \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (1.4)$$

een dimensieloze koppelingsconstante is. In deze uitdrukking is ϵ_{∞} de permitiviteit bij hoge frequenties en ϵ_0 de vacuüm permitiviteit. Het elektron verliest/krijgt zo een impuls $\vec{k}$ via emissie/absorptie van een boson. Storingsrekening [9] leert ons dat na koppeling van het elektron met haar polarisatiewolk, het energieprofiel van het elektron verlaagt zodat deze gevangen komt te zitten in een potentiaalput, met diepte evenredig aan de koppelingssterkte [1]. In het zwakke koppelingsregime

$$\alpha_{LO} \ll 1, \quad (1.5)$$

is dit effect niet sterk waardoor het polaron zich gedraagt als een vrij elektron met dichtheidsoperator $e^{i\vec{k}\cdot\hat{r}}$ in plaats van zich te lokaliseren in het rooster. Het effect van roostervervorming kan hierdoor meegenomen worden in een hogere elektron *band*-massa m die ervoor zorgt dat de mobiliteit van het elektron daalt. In dit regime heeft de storing een grote reikwijdte in vergelijking met de roosterparameter. We spreken daarom van een *groot* polaron of Fröhlich polaron met Fröhlich Hamiltoniaan [9] in tweede kwantisatie

$$\hat{H}_{\text{Fröhlich}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} V(\vec{q}) e^{i\vec{k}\cdot\hat{r}} \left(\hat{a}_{\vec{k}} + \hat{a}_{-\vec{k}}^{\dagger} \right), \quad (1.6)$$

die de kinetische energie van het mobiel elektron, het ideaal fonon gas en de interactie ertussen samenneemt. Naast het Fröhlich polaron kan vergelijking 1.6 meerdere polaron effecten beschrijven als we de dispersie $\omega_{\vec{k}}$ en interactie $V(\vec{k})$ aanpassen. Meer algemeen beschrijft dit een quasi-deeltje dat interageert met een bad van vrije bosonen. De polaron definitie wordt hiermee uitgebreid naar elk systeem dat kan afgebeeld worden op de Fröhlich Hamiltoniaan.

Er is geen transformatie die de Hamiltoniaan diagonaliseert¹. Wil men toch de polaronische energie berekenen, dan gebruikt men benaderingsmethoden afhankelijk van het koppelingsregime waarin deze opgaat. Fröhlich berekende de vrije polaron energie voor zwakke koppeling via storingsrekening tot op de tweede orde van α_{LO} [9]. Deze is equivalent aan Lee, Low en Pines die de energie in dit regime berekenen op een variationele manier door een canonische transformatie [11]. De kwantum Monte Carlo methode [28] geeft een numerieke oplossing voor de polaron energie. Feynman gebruikte zijn padintegraal theorie om de energie te berekenen op een variationele manier, en kwam voor zwakke koppeling dezelfde oplossing uit als de kwantum Monte Carlo methode [12].

De regio van sterke koppeling $\alpha_{LO} \gg 1$ wekt interesse op doordat de theorie hier discrepanties vertoont met de kwantum Monte Carlo simulaties [47, 50]. Het is in deze regio dat het polaron quasi-deeltje een gebonden toestand vormt met het rooster. Het rooster buigt hard na inbrenging van het elektron, waardoor deze in een diepere potentiaalput terecht komt en lokaliseert. Voor een *klein* polaron gaat de beschrijving in vergelijking 1.6 niet meer op - een equivalente bandmassa zou immers oneindig moeten zijn.

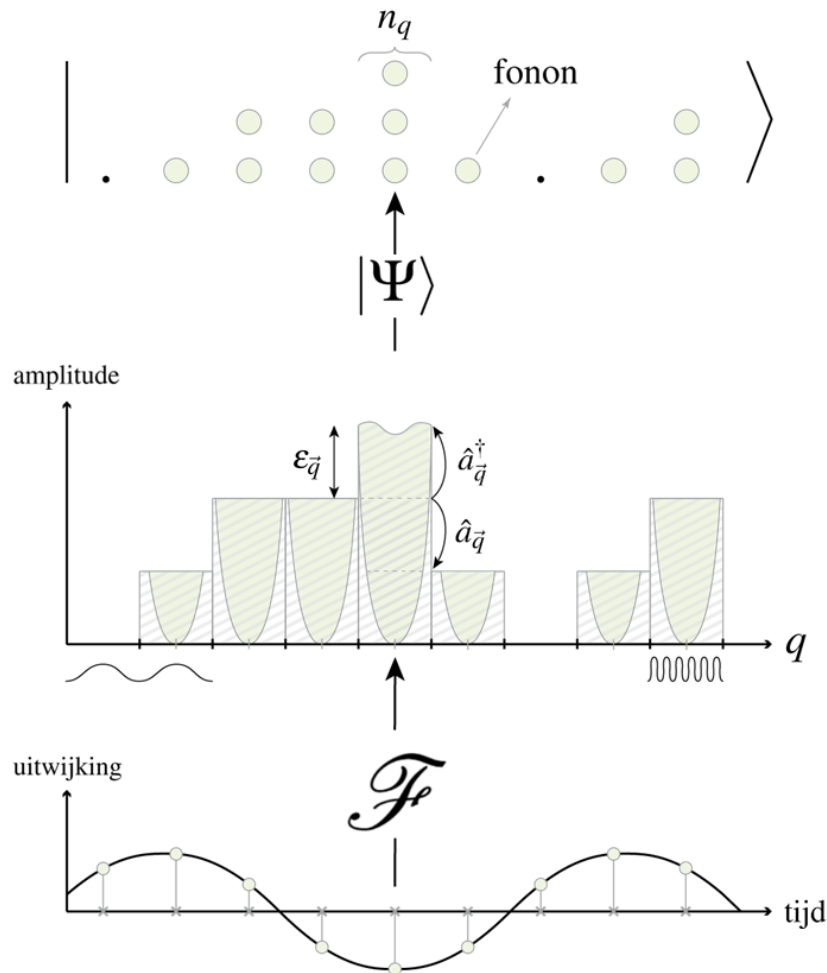
Het sterke koppelingsregime is niet experimenteel bereikbaar voor een Fröhlich polaron waar een ladingsdrager koppelt met de roostervervorming [45], maar het is juist deze regio die we willen bekijken. Als oplossing hiervoor werd de mogelijkheid bekeken om het sterke koppelingsregime te verkrijgen door gebruik van kwantum gassen. Het is bewezen dat een neutraal impureteit in een Bose-Einstein condensaat ook door dezelfde Hamiltoniaan beschreven kan worden als

¹‘The Fröhlich polaron Hamiltonian has resisted exact analytical diagonalization since 1952’ [19]

het Fröhlich polaron [19], waardoor we eerder beschreven oplossingsmethoden kunnen hergebruiken. In plaats van een vaste stof, gebruiken we een Bose-Einstein condensaat als omgeving. Het is de experimentele afstembaarheid hiervan dat deze zo aantrekkelijk maakt voor het simuleren van veellichaams theorieën. Zo kan een impureteit dat koppelt met een BEC een Fröhlich polaron simuleren. Het medium vervangen door een Bose gas heeft als voordeel dat het sterke koppelingsregime wel bereikt kan worden door gebruik van Feshbach resonantie.

De methode die Feynman voorstelde is verder vaak gebruikt in de context van polaron effecten omdat ze geldig is voor alle koppelingssterkten. Dit resultaat is echter enkel correct onder de aanname dat het polaron nog steeds de Fröhlich Hamiltoniaan volgt wat problemen kan veroorzaken voor de sterke koppelingsregio die we willen bekijken. Een impureteit die sterk lokaliseert in het Bose gas zorgt een voor grote depletie in het condensaat zodat deze beschrijving niet meer opgaat. Deze voorwaarde komt terug in hoofdstuk 2 onder de Bogoliubov benadering.

De problemen afkomstig uit sterke koppeling kunnen geremedieerd worden door de dimensies te reduceren. Een dimensiereductie zorgt ervoor dat het regime van sterke koppeling voor een lagere polaronische koppelingsconstante al bereikt wordt [48]. Het gebruik van optische roosters laat toe de geometrie van het Bose-Einstein condensaat aan te passen waar we in sectie 1.3 dieper op in gaan. Alvorens ons zorgen te maken over de experimentele opstelling, herintroduceren we eerst het Bose-Einstein condensaat in twee dimensies.



Figuur 1.1: De bezettingsgetallen representatie (boven) is af te lezen uit de meest elementaire Fourier transformatie (midden) van de roosteruitwijkingen (onder). De fonon quasi-deeltjes (boven) vullen de set harmonische oscillatoren op (midden) met overeenkomstige bijdrage aan de totale oscillatie (onder).

1.2 Vrij Bose gas in twee dimensies

Door een Bose gas af te koelen tot dichtbij het absolute nulpunt gaat een groot deel van de bosonen geforceerd worden in de grondtoestand. Wanneer dit macroscopisch bezet is spreken we van een Bose-Einstein condensaat (BEC).

De beginselen voor de Bose-Einstein statistiek stemden al uit 1924 wanneer Bose zijn theorie voor kwantumstatistiek voorlegde aan Einstein. Dit liet toe om nieuwe fysica te beschrijven die verder gaat het klassieke geval. Pas jaren later in 1995, is het eerste gasvormig Bose-Einstein condensaat experimenteel waargenomen door Eric Cornell en Carl Wieman aan de universiteit van Colorado in Boulder NIST-JILA lab, waarbij een gas van Rubidium atomen gekoeld werd tot 170 nano Kelvin [6]. Dit gebeurde gelijktijdig met Ketterle en medewerkers aan het MIT die gebruik maakten van een gas Rubidium atomen. In deze thesis gebruiken we een Rubidium gas om ons iets bij te leren over het geladen Bose polaron in twee dimensies.

De golf-deeltje dualiteit associeert aan elk boson ook een golffunctie. De de Broglie golflengte λ_{dB} geeft de spreiding op de positie van het boson ten gevolge van kwantummechanische onzekerheid

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad (1.7)$$

waarin $\hbar$ de gereduceerde constante van Planck is, m de massa van het boson, k_B de Boltzmann constante en T de temperatuur in Kelvin. Wanneer bij afkoeling de spreiding op de positie door kwantummechanische onzekerheid even groot wordt als de afstand tussen de atomen r , overlappen de golffuncties en beschrijven we de bosonen door kwantumstatistiek. We veronderstellen dat voor een twee/drie dimensionaal Bose gas één boson een oppervlakte/volume eenheid inneemt met straal r , zodat de deeltjesdichtheid gegeven wordt door

$$n^{2D} = \frac{N}{A} = \frac{1}{r^2 \pi}, \quad n^{3D} = \frac{N}{V} = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r^3}. \quad (1.8)$$

in pool/sferische coördinaten. Indien de ruimte ingenomen door de kwantummechanische onzekerheid λ_{dB}^d bij benadering gelijk is aan de ruimte $1/n$ ingenomen door één boson of

$$n\lambda_{dB}^d \approx 1, \quad (1.9)$$

dan zit het d -dimensionaal Bose gas in het kwantummechanisch regime waarvoor bosonen *in thermisch evenwicht* voldoen aan de de Bose-Einstein statistiek. De Bose-Einstein verdeling of de bezettingsgraad voor energie ϵ , gegeven door

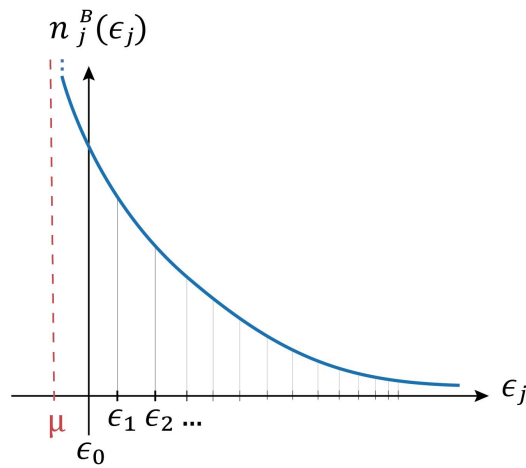
$$n_B(\epsilon) = \frac{1}{e^{\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right)} - 1}, \quad (1.10)$$

wordt getoond in Figuur 3.1 met μ de chemische potentiaal die de verandering in interne energie voorstelt bij toevoeging van een boson aan gas. Daarnaast is de grondtoestandsenergie ϵ_0 de bovengrens voor μ wat betekent dat alle energieniveaus hoger liggen dan de chemische potentiaal. Uit vergelijking 1.10 volgt ook dat de bezettingsgraad eindig is voor alle energieniveaus hoger dan μ . Dit betekent dat maar een beperkt aantal bosonen de geëxciteerde energieniveaus kunnen bezetten. Als we de chemische potentiaal opdrijven tot haar maximale waarde heeft de grondtoestand een oneindige bezettingsgraad. We kunnen ons de vraag stellen op welke manier we een *vast* aantal bosonen N kwijt geraken in de energieniveaus. We bekijken of de som van bezettingen van alle geëxciteerde toestanden

$$N_{exc} = \sum_{\epsilon_j > \epsilon_0} n_B(\epsilon) = C_\gamma (k_B T)^\gamma \zeta(\gamma) \Gamma(\gamma), \quad (1.11)$$

groot genoeg is voor ons vast gekozen aantal bosonen. Deze werd berekend in [1] en [2] met C_γ een constante, ζ de Riemann-zeta functie en Γ de gamma functie. Daarnaast is het aantal geëxciteerde bosonen afhankelijk van een parameter γ die bepaald wordt door de dimensie en de aard van het opsluitingspotentiaal. Een paar mogelijkheden voor verschillende waarden van γ wordt gegeven in Tabel 1.1. De temperatuur T_c waar er evenveel bezettingsmogelijkheden zijn in de geëxciteerde energieniveaus als bosonen,

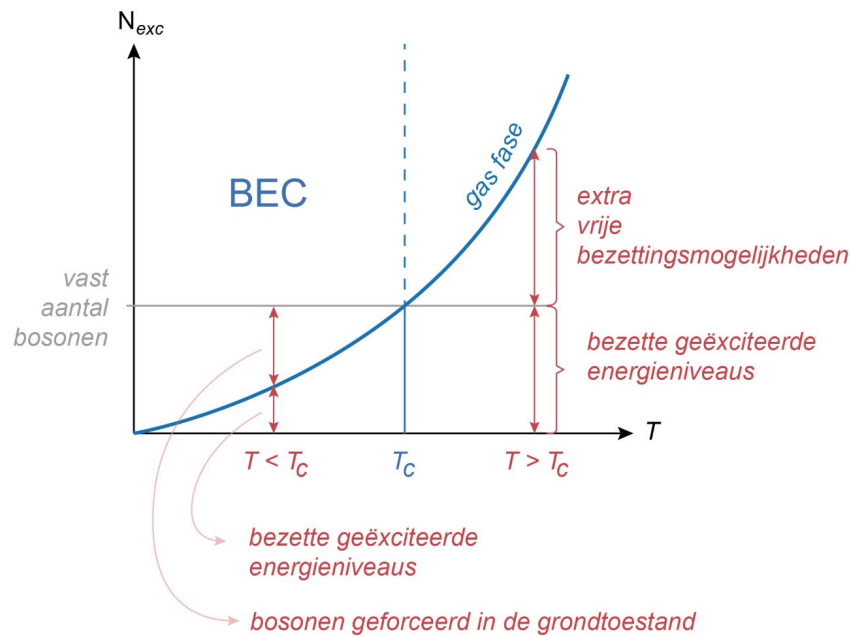
$$N = N_{exc}^{max} = N_{exc}(T_c), \quad (1.12)$$



Figuur 1.2: De bezettingsgraad n_j^B voor energieniveau ϵ_j . Voor $\mu = \epsilon_0$ heeft de grondtoestand een oneindige bezettingsgraad.

γ	1	3/2	2
$\zeta(\gamma)$	∞	2.612...	$\pi^2/6$
$\Gamma(\gamma)$	1	$\sqrt{\pi}/2$	1

Tabel 1.1: Het aantal geëxciteerde bosonen N_{exc} is afhankelijk van parameter γ die bepaald wordt door de dimensie en opsluiting.



Figuur 1.3: Het aantal geëxciteerde bezettingsmogelijkheden N_{exc} is temperatuurafhankelijk. Op $T = T_c$ is de bezettingsgraad gelijk aan het vast aantal bosonen.

definiëren we als de kritieke temperatuur. We bekijken eerst het geval van een driedimensionaal vrij Bose gas, opgesloten in een doos-potential waarbij $\gamma = 3/2$. Uit Tabel 1.1 krijgen we de relatie $N_{exc}(T) \sim T^{3/2}$, afgebeeld in figuur 1.3, waarop we het vast aantal bosonen aanduiden. Verder afkoelen onder de kritieke temperatuur forceert de bosonen in de grondtoestand doordat er minder geëxciteerde bezettingen zijn dan aantal bosonen. Wanneer er zoveel bosonen N_0 in de grondtoestand zitten dat de grondtoestand macroscopisch bezet wordt, spreken we van een Bose-Einstein condensaat.

Voor een tweedimensionaal vrij Bose gas in een doospotential krijgen we $\gamma = 1$ in Tabel 1.1. De Riemann-zeta functie $\zeta(\gamma)$ komt hier uit op de harmonische reeks en deze divergeert. De bezettingsgraad van de geëxciteerde toestanden is volgens vergelijking 1.11 dus oneindig. Dit heeft als gevolg dat een Bose gas van een oneindig aantal deeltjes steeds in de geëxciteerde energieniveaus past waardoor een macroscopische grondtoestand onmogelijk wordt. Substitutie van vergelijking 1.12 in 1.11 laat zien dat dit neerkomt op een kritieke temperatuur $T_c \rightarrow 0$.

Dat Bose-Einstein condensatie van een vrij tweedimensionaal Bose gas niet mogelijk is, is tevens een gevolg van het Mermin-Wagner-Hohenberg theorema [3]. Het theorema zegt dat een tweedimensionaal systeem met continue symmetrie niet geordend kan worden over een grote afstand. We bekijken wat dit betekent voor een Bose gas in twee dimensies.

De veeldeeltjesgolffunctie van het vrij Bose gas $|\Psi\rangle$ ontbindt in ééndeeltjes golffuncties van de pure kwantumtoestanden zoals we zien in de bezettingsgetallenrepresentatie. Ook onder de kritieke temperatuur, heeft het vrij Bose gas thermische fluctuaties die de kwantumtoestanden mengen. Volgens het Penrose-Onsager criterium [8], kunnen we ondanks deze fluctuaties van een Bose-Einstein condensaat spreken wanneer de bijdrage van de grondtoestandsfunctie $|\phi_0\rangle$ zo groot is, dat de veeldeeltjesgolffunctie

$$|\Psi\rangle \approx N_0 |\phi_0\rangle, \quad (1.13)$$

benaderd kan worden hierdoor. Hierbij veronderstellen we dat het effect van thermische fluctuaties verwaarloosbaar klein is op de golffunctie van het condensaat. Een geslaagd BEC is geordend in de zin dat de identieke bosonen in de grondtoestand dezelfde golffunctie delen met coherente fase. De golffunctie in 1.13 noemen we de orde-parameter van het condensaat en is gelinkt aan de gereduceerde dichtheidsmatrix

$$\hat{\rho}_1 = |\Psi\rangle\langle\Psi| \approx N_0 |\phi_0\rangle\langle\phi_0|, \quad (1.14)$$

die de correlatie berekent tussen twee bosonen op een relatieve afstand van elkaar. Bij een geordende toestand voorspelt één boson in de grondtoestand dus de golffunctie van de andere. Het Mermin-Wagner-Hohenberg theorema beschrijft dan dat in twee dimensies, een boson fase coherentie verliest met andere bosonen - een effect dat erger wordt op grotere relatieve afstand.

1.3 Experimentele opstelling

Tabel 1.1 geeft een idee over hoe we er toch in slagen om een tweedimensionaal Bose-Einstein condensaat te maken. Theoretisch vinden we waarde $\gamma = 2$ wanneer we een tweedimensionaal vrij Bose gas beschouwen in *harmonische* opsluitingspotential. De Riemann-zeta functie in γ is een hyperharmonische reeks en convergeert. We krijgen dus een eindige waarde voor N_{exc} waardoor op een kritieke temperatuur $T_c > 0$ condensatie plaatsvindt.

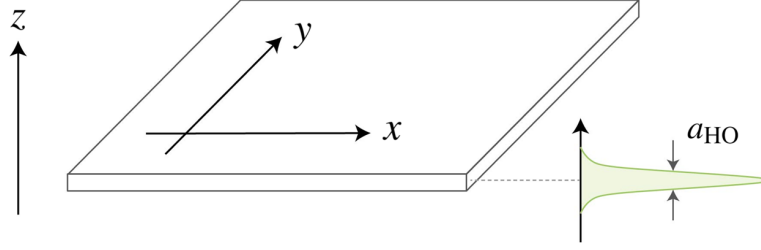
Experimenteel maken we een effectief tweedimensionaal Bose gas door een driedimensionaal gas te koelen (o.a. via verdampingskoeling [3]) onder kritieke temperatuur en op te sluiten in een harmonisch opsluitingspotential met sterk anisotropisch karakter. Dit betekent dat één oscillatiefrequentie van de opsluitingspotential veel sterker is

$$\omega_z \gg \omega_x, \omega_y, \quad (1.15)$$

waardoor één bewegingsrichting sterk wordt beperkt (hier de z -richting). Zo'n Bose-Einstein condensaat in "flatland" werd experimenteel gerealiseerd [4] voor een gas van Rubidium ^{87}Rb atomen. Concreet wordt de Bose wolk opgesloten in een ééndimensionaal optisch rooster in de z -richting wat deze samendrukt tot een tweedimensionaal gas. We nemen de grootte van de opsluiting veel kleiner dan de karakteristieke lengte ξ waarover de orde parameter van het condensaat varieert². Op deze manier kan het condensaat in de z -richting niet veranderen over de karakteristieke lengte a_{HO} van de opsluiting wanneer deze veel kleiner is dan de healing lengte ξ . Concreet komt dit neer op de voorwaarde

$$a_{HO} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_z}} \ll \xi, \quad (1.16)$$

²De auteur vraagt zich hier ook af of 3D condensaten kunnen opgerold worden in een spiraal over een dikte kleiner dan ξ en of de coherentie hiermee zou verhogen.



Figuur 1.4: Een effectief tweedimensionaal Bose gas opgesloten door een optisch rooster in de z -richting heeft een Gaussisch dichtheidsprofiel met karakteristieke lengteschaal a_{HO} [7].

die moet voldaan zijn. Wat overblijft, is een effectief tweedimensionaal gas in het x, y -vlak in een harmonische opsluitingspotentiaal met Gaussisch dichtheidsprofiel zoals gegeven in Figuur 1.4. Het Bose gas zou volgens vergelijking 1.11 moeten condenseren op een temperatuur $T_c > 0$. Uit het Mermin-Wagner-Hohenberg theorema volgt echter dat de thermische fluctuaties in dit geval een grote rol spelen, die op grote schaal de coherentie vernietigen. Condensatie van het Bose gas uit onze beschrijving is dus mogelijk, maar extreem fragiel.

Een oplossing hiervoor is geen vrij maar een *interagerend* Bose gas te beschouwen. In dit geval, houdt de coherentie stand over grotere afstanden [7]. Is dit macroscopisch groot, dan kunnen we daar *quasi*-condensaat definiëren. We zeggen dat onder een kritische temperatuur het Bose gas een Berezinskii-Kosterlitz-Thouless fase overgang ondergaat. Het experiment in [6] beschrijft deze onconventionele definitie voor faseovergang naar BEC en hoe dit eruitziet voor het ^{87}Rb gas. Hoog tijd dus om boson-boson interacties toe te voegen aan onze beschrijving.

1.4 Interagerend Bose gas

De Hamiltoniaan in eerste kwantisatie van interagerende bosonische deeltjes in relatieve coördinaat $\vec{r}$,

$$\hat{H}_{BB} = \frac{p^2}{2(m_B/2)} + V_{BB}(|\vec{r}|), \quad (1.17)$$

beschrijft een vrij deeltje met gereduceerde massa $m_B/2$ en een sferisch symmetrische boson-boson interactie potentiaal. We veronderstellen een ijl Rubidium gas zodat de reikwijdte van het potentiaal klein is ten opzichte van de andere lengteschalen, zoals λ_{dB} en de afstand tussen de bosonen r . Daarnaast stellen we de reikwijdte van de potentiaal veel kleiner dan de opsluiting in de z -richting, waardoor we de verstrooiing als driedimensionaal kunnen beschouwen.

Kijken we als observeerder ver van de verstrooier, dan zijn de details van de interactie onbelangrijk en kan de boson-boson interactie aangepakt worden als verstrooiingsprobleem waarbij in eerste orde de ingaande vlakke golf een faseverschuiving meekrijgt na interactie met een harde bol verstrooier. In de Born benadering berekenen we de golffunctie na verstrooiing $\Psi(\vec{r})$ op een recursieve manier met ingaande vlakke golf $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ als leidende oplossing. In de eerste Born benadering substitueren we dit één keer. De golffunctie na verstrooiing, gegeven door

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{i\vec{k}'\vec{r}}}{r}, \quad (1.18)$$

is een combinatie van een vlakke golf plus een sferisch uitdijende golf. Hierin werd de de verstrooiingsamplitude berekend op [2]

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{(m_B/2)}{2\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle. \quad (1.19)$$

Deze is gelinkt aan boson-boson verstrooiingsparameter

$$a_{BB} = -f(\vec{k}', \vec{k}). \quad (1.20)$$

We verkrijgen $f(\vec{k}', \vec{k})$ door de boson-boson interactie naar relatieve (interatomaire) coördinaten r te brengen met $m_B/2$ als gereduceerde massa. Uit vergelijkingen 1.19 en 1.18 zien we dat op een afstand ver van de verstrooier, de golffunctie door interactie verschuift met a_{BB} . Dit effect gaat naar nul voor $\vec{r} \rightarrow +\infty$ waardoor dit geen bedreiging vormt voor de

fase-coherentie op macroscopische afstanden. We hebben uit experiment [4] de 3D verstrooiing lengte en karakteristieke lengte van de harmonische potentiaal in de z -richting

$$a_{BB} \Big|_{87\text{Rb}} = 5.2 \text{ nm} \ll a_{HO} = 170 \text{ nm}, \quad (1.21)$$

wat overeenkomt met gekende verstrooiingsparameter $a_{BB}/a_B = 106 \pm 4$ in [30] met $a_B = 0.0529 \text{ nm}$ de Bohr straal.

Ongelijkheid 1.21 leert ons dat de bosonen ruimte hebben om verstrooid te worden in de z -richting zodat vergelijking 1.18 voor driedimensionale verstrooiing opgaat. We hebben hierdoor te maken met een *quasi*-tweedimensionaal Bose-Einstein condensaat. Een *werkelijk* tweedimensionaal condensaat zou in ons geval vereisen dat we extreem sterke interacties hebben in vergelijking met de opsluiting $a_{HO} \ll a_{BB}$ in [31]. Dit is experimenteel moeilijk: zo zou bijvoorbeeld de golffunctie na verstrooiing met factor $\sim 1/\sqrt{r}$ uitdijen [32] in tegenstelling tot een met factor $\sim 1/r$ in het quasi-tweedimensionaal 1.18 geval. De faseverschuiving voor een werkelijk tweedimensionaal BEC zou daarom op langere afstanden voelbaar zijn. Dit is nefast voor macroscopische orde fase-coherentie wat condensaatvorming bemoeilijkt.

Maar zelfs in het centrum van de 2D harmonische opsluitingspotentiaal waar de ontaarding het grootste is, is de oppervlakte a_{BB}^2 ingenomen door de verstrooiing kleiner dan de ruimte $1/n$ ingenomen door één boson [4]

$$n a_{BB}^2 \ll 1. \quad (1.22)$$

Als gevolg hiervan zit er meestal geen ander boson in de interactiepotentiaal reikwijdte. Voor een ijl Bose gas hebben we relatief zwakke boson-boson interacties en nemen we de benadering ver van de verstrooier waardoor we de interactiepotentiaal kunnen voorstellen als contactpotentiaal

$$V(\vec{r}) = g_{BB} \delta(\vec{r}), \quad (1.23)$$

zodat de bosonen op dezelfde positie komen te liggen. Hierbij gebruiken de puntdeeltjes benadering omdat de verstrooiing

$$a_{BB} \gg a_B \quad (1.24)$$

op veel grotere afstand gebeurt dan de atoomgrootte. Het gewicht voor de contactpotentiaal g_{BB} in vergelijking 1.23 is de boson-boson interactie amplitude die wordt berekend als transitie amplitude

$$\langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k} \rangle = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}'\vec{r}} g_{BB} \delta(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} = g_{BB}, \quad (1.25)$$

van toestand $\vec{k}$ voor de ingaande golf naar $\vec{k}'$ van de uitgaande golf. 1.25 is geldig in elk integratiedomein rond de delta-piek. Substitutie in vergelijking 1.19 laat zien dat de verstrooiingsparameter en boson-boson interactie amplitude

$$a_{BB} = \frac{(m_B/2) g_{BB}}{2\pi\hbar^2} \iff g_{BB} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B}, \quad (1.26)$$

impulsonafhankelijk zijn. Door de repulsieve boson-boson interacties $g_{BB} > 0$ hebben we een stabiel condensaat. Voor een veeldeeltjessysteem van identieke deeltjes is het zinvol om over te gaan naar de bezettingsgetallenrepresentatie. We stellen dat deeltjes van toestand wisselen via bosonische creatie $\hat{a}_k^\dagger$ en annihilatie $\hat{a}_k$ operatoren die we definiëren door twee dingen: wat deze doen op de basisvectoren en een commutatierelatie tussen de twee operatoren

$$\text{bosonen} = \begin{cases} \hat{a}_k^\dagger |n_1 n_2 \dots n_k \dots\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |n_1 n_2 \dots n_k + 1 \dots\rangle \\ \hat{a}_k |n_1 n_2 \dots n_k \dots\rangle &= \sqrt{n_k} |n_1 n_2 \dots n_k - 1 \dots\rangle \\ \hat{a}_k |n_1 n_2 \dots 0 \dots\rangle &= |0\rangle \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= \delta_{k,k'}. \end{cases} \quad (1.27)$$

De boson-boson interactie Hamiltoniaan in tweede kwantisatie, gegeven door

$$\hat{H}_{BB} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V_{BB}(\vec{q}) \underbrace{\hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger}_{\text{creatie na uitwisseling impuls}} \underbrace{\hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger}_{\text{annihilatie}}, \quad (1.28)$$

beschrijft bosonen die een impuls oppikken/afgeven waardoor de initiële kwantumtoestand wordt geannihileerd en een nieuwe kwantumtoestand gecreëerd. We brengen alle mogelijke processen in rekening die impulsbehoud gehoorzamen

en we zetten een factor $1/2$ buiten om dubbeltellen te vermijden. De bosonen wisselen een impuls $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ uit met als interactieamplitude de Fourier transformatie van de boson-boson interactiepotentiaal,

$$V_{BB}(\vec{q}) = \frac{1}{A} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} \iff V_{BB}(\vec{q}) = \frac{g_{BB}}{A} = \frac{2\pi\hbar^2 a_{BB}}{(m_B/2)A}, \quad (1.29)$$

die we herkennen in 1.25 op een normering met het condensaat oppervlak A na. De vrije Rubidium atomen zijn bosonische deeltjes met impuls $\hbar\vec{q}$ en kinetische energie $\epsilon_{\vec{q}}$ die samen bijdragen aan de Hamiltoniaan van het vrij Bose gas. Deze Hamiltoniaan en kinetische energie worden respectievelijk gegeven door

$$\hat{H}_B = \sum_{\vec{q}} \epsilon_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}, \quad \epsilon_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}. \quad (1.30)$$

Via perturbatietheorie [1] rekenen we uit dat de energie van een vrij Bose gas daalt na het invoeren van de boson-boson interacties 1.28, desondanks het feit dat deze interacties repulsief zijn. Dit energieverschil komt uit de *exchange contribution* en is eigenlijk een correctie op de energie zodat deze klopt voor identieke deeltjes. [31] rekt dit energieverschil uit in de Hartree-Fock gemiddelde-veld benadering als $2g_{BB}n$. Deze wordt dan meegenomen in de hergedefiniëerde chemische potentiaal na interacties via

$$\mu \rightarrow \mu - 2g_{BB}n. \quad (1.31)$$

Dat interacties condensaatvorming vereenvoudigen, is te zien door de verlaagde chemische potentiaal $\mu < 0$. Het wordt moeilijker om een boson te verwijderen uit het condensaat, omdat de kinetische energie een barrière $2g_{BB}n$ moet overwinnen. Op deze manier is het condensaat een soort gebonden toestand³, wat ook geldt op kleinere schaal voor de bosonen. Dit zien we ook in de Hartree-Fock gemiddelde-veld benadering die de gebonden toestand op kwantum-grootte voor de bosonen naar macroscopisch niveau brengt voor het Bose gas - een procedure dat overigens vaak gehanteerd wordt in de context van statistische fysica.

De healing lengte ξ komt overeen met de karakteristieke lengte waarop het boson een potentiaalput overwint met diepte $2g_{BB}n$ ten gevolge van de boson-boson interacties:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2(m_B/2)} + 2g_{BB}n \right) \Psi(\vec{r}) \Big|_{r=\xi} = -2g_{BB}n \Psi(\vec{r}) \Big|_{r=\xi}. \quad (1.32)$$

Hierin is $m_B/2$ de gereduceerde massa van het boson-boson systeem. Stel nu dat de boson ééndeeltjesgolffunctie $\Psi(\vec{r})$ de vorm $\sim 1/r$ aanneemt van een sferisch uitdijende golf zoals in vergelijking 1.18. We krijgen dan de radiële Schrödinger-vergelijking terug (waar ∇ de radiële richtingsafgeleide voorstelt)

$$\frac{\hbar^2}{2(m_B/2)r^2} \Psi(r) \Big|_{r=\xi} = 2g_{BB}n \Psi(r) \Big|_{r=\xi}, \quad (1.33)$$

waaruit de karakteristieke lengte en de overeenkomstige energie respectievelijk af te lezen zijn als

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2n g_{BB} m_B}} = \frac{1}{\sqrt{8\pi n a_{BB}}}, \quad \epsilon = \frac{\hbar^2}{m_B \xi^2}. \quad (1.34)$$

Wanneer de bosonen hun ééndeeltjes golffunctie overlappen, interageren ze repulsief met elkaar. Hierdoor trachten de bosonen hun energie te verlagen door zich te verwijderen van een afstand met elkaar. Langs de andere kant kost het energie om de golffunctie te buigen zodat de kans op interactie kleiner wordt. Het is voor de interagerende bosonen dan energetisch het voordeligst om hun golffunctie te buigen over een healing lengte ξ . Afstanden voor Bose-Einstein condensaten worden typisch uitgedrukt in deze lengteschaal, zoals handig blijkt te zijn in sectie 3.5, waarbij we de polaron parameters omvormen in dimensieloze eenheden.

1.5 Tweedimensionaal geladen Bose polaron

Voor een polaron effect te creëren, is het essentieel een onzuiverheid toe te voegen waarmee het condensaat koppelt. Door de aard van de interactiepotentiaal, is een geladen onzuiverheid echter meer geschikt om de regio van sterke koppeling te

³De auteur denkt hierbij aan een Bose-Einstein condensaat in een 'ballon' met μ als membraan.

onderzoeken dan zijn neutrale tegenhanger. We leiden in sectie 1.5 af dat door de onzuiverheid een lading toe te wijzen, de interactiepotentiaal niet meer benaderd kan worden als contactpotentiaal. Dit maakt de berekeningen moeilijker, maar het is juist dit lange afstands karakter dat we willen bekijken.

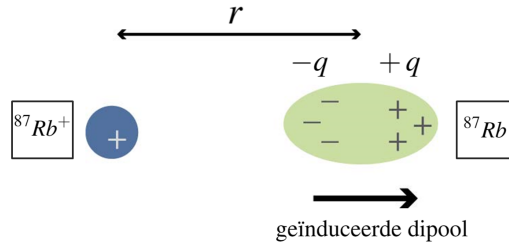
Het geladen Bose polaron is een quasi-deeltje dat ontstaat als gevolg van een mobiele, geladen impureiteit $^{87}\text{Rb}^+$ met massa m in te brengen in een interagerend Bose-Einstein condensaat van Rubidium atomen ^{87}Rb . De impureiteit wordt op zichzelf beschreven door

$$\hat{H}_I = \frac{\hat{p}^2}{2m}. \quad (1.35)$$

Concreet creëert het ion een asymmetrische ladingsverdeling van de elektronenwolk rond het Rubidium atoom, wat een dipoolveld induceert, zoals weergegeven in Figuur 1.5. We stellen hierdoor dat de impureiteit-boson interactiepotentiaal *in laagste orde* op verre afstand dezelfde vorm heeft als de elektrostatistische interactie tussen een ion en een geïnduceerde dipool [13] op afstand r

$$V_{IB}(r) \approx -\frac{a}{r^4}, \quad (1.36)$$

waarbij parameter a de functie heeft van de Van der Waal's coëfficiënt C_4 [33] die de sterkte van de interactie karakteriseert. Van nature heeft a de waarde van de Van der Waal's coëfficiënt C_4 , maar we kunnen dit experimenteel variëren.



Figuur 1.5: De interactie tussen de geladen impureiteit en een boson is op lange afstanden gelijkaardig aan de interactie tussen een ion en een geïnduceerde dipool.

We zien in Figuur 1.6 dat bosonen terechtkomen in een gebonden toestand als de kinetische energie kleiner is dan de interactiepotentiaal 1.36 geïnduceerd door de impureiteit. De karakteristieke lengte R wordt gedefinieerd als de afstand tot de impureiteit waarop het boson de potentiaalput overwint

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu_{IB}} + V_{IB}(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) \Big|_{r=R} = -V_{IB}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \Big|_{r=R}, \quad (1.37)$$

met μ_{IB} de gereduceerde massa van het impureiteit-boson systeem. Stel nu dat de boson één-deeltjesgolffunctie $\Psi(\vec{r})$ de vorm aanneemt van een sferisch uitdijende golf van de vorm $\sim 1/r$, zoals in vergelijking 1.18. We krijgen dan uit de radiële Schrödingervergelijking

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_{IB}r^2} \Psi(r) \Big|_{r=R} = \frac{a}{r^4} \Psi(r) \Big|_{r=R}. \quad (1.38)$$

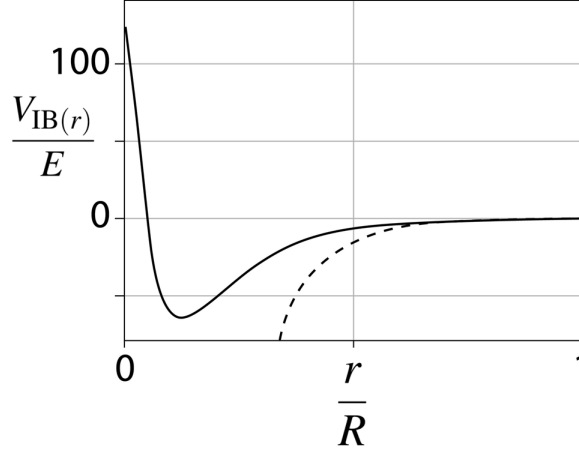
De karakteristieke lengte en overeenkomstige energie zijn dan respectievelijk af te lezen als

$$R = \sqrt{\frac{2\mu_{IB}a}{\hbar^2}}, \quad E = \frac{a}{R^4} = \frac{\hbar^2}{2\mu_{IB}R^2}. \quad (1.39)$$

De elektrostatistische interactiepotentiaal in 1.36 heeft een groot bereik, in tegenstelling tot een neutrale impureiteit waarvoor een contactpotentiaal $V_{IB}(\vec{r}) = g_{IB}\delta(\vec{r})$ werd gebruikt in [19]. In [27] stellen de auteurs een potentiaalput met diepte $V_{IB}(r) = -V_0$ voor bij attractieve impureiteit-boson interacties. Om de singulariteit op kleine afstanden van vergelijking 1.36 te verhelpen, wordt gereguleerde versie van de interactiepotentiaal, gegeven door

$$V_{IB}(r) = -\frac{a}{(r^2 + b^2)^2} \frac{r^2 - c^2}{r^2 + c^2}, \quad V_{IB}(r) \Big|_{c=0} = -\frac{a}{(r^2 + b^2)^2}, \quad (1.40)$$

voorgesteld als pseudo-potentiaal die het gedrag op lange afstanden nabootst [14], zoals te zien is op Figuur 1.6. Parameter c bepaalt een repulsieve barrière voor de potentiaal voor $r < c$ en parameter b is gerelateerd aan de diepte. We kiezen er



Figuur 1.6: De singuliere ion-geïnduceerde dipool interactie 1.36 (stippellijn) benadert de geregleerde impureit-boson quasipotential (volle lijn) op lange afstanden [14].

verder steeds voor om zonder repulsieve barrière te werken of dus voor $c = 0$. De impureit wisselt met de bosonen een impuls $\vec{q}$ uit met interactiesterkte gelijk aan de Fourier-transformatie

$$V_{IB}(q) \Big|_{c=0} = \frac{a}{b} \frac{\pi^2}{A} e^{-bq} = \frac{g_{IB}(\vec{q})}{A} \iff g_{IB}(\vec{q}) = \frac{a}{b} \pi^2 e^{-bq}. \quad (1.41)$$

Op dezelfde manier als vergelijking 1.29, is de impureit-boson interactie-amplitude g_{IB} gelijk aan de impureit-boson interactiepotentiaal, op een normering met condensatooppervlak A na. Door de grote reikwijdte mogen we niet stellen dat de interactieamplitude g_{IB} constant is - iets dat bij boson-boson interacties wel het geval was. Ook al is hierdoor de overeenkomstige impureit-boson verstrooiingsparameter a_{IB} niet expliciet bepaald, experimenteel kan men Feshbach resonantie [16] gebruiken om deze te tunen. In [17] analyseren de auteurs op deze manier een neutraal Bose polaron van zwak tot sterk interagerend regime. In [20] gebruiken de auteurs Feshbach resonantie om a_{IB} op te drijven boven een kritieke waarde zodat de impureit lokaliseert.

We brengen alle impulsuitwisselingen $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$ die behoud van impuls gehoorzamen in rekening in de impureits-boson interactie Hamiltoniaan

$$\hat{H}_{IB} = \sum_{\vec{k}', \vec{k}, \vec{q}} V_{IB}(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}'} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V_{IB}(\vec{q}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \quad (1.42)$$

waarin $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ en $\hat{c}_{\vec{k}}$ de creatie en annihilatie operatoren voor de impureit respectievelijk zijn. We herkennen hierin de impureitsdichtheid ρ_I als ééndeeltjesoperator in eerste, resp. tweede, kwantisatie

$$\hat{\rho}_I(\vec{q}) = e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'}. \quad (1.43)$$

Deze sommeert over alle kwantumtoestanden waar $\vec{k}'$ terecht kan komen, wat de som over $\vec{k}'$ wegneemt in de interactie Hamiltoniaan. In tegenstelling tot de boson-boson interactie hebben we hier geen voorfactor $1/2$ doordat de bosonen momenta $\vec{q} < 0$ oppikken dat de impureit verliest. We kunnen nu de totale Hamiltoniaan $\hat{H}_{pol} = \hat{H}_I + \hat{H}_B + \hat{H}_{BB} + \hat{H}_{IB}$ opstellen voor een geladen impureit in een tweedimensionaal Bose-Einstein condensaat [19]:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{q}} \epsilon_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} V_{BB}(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}'} + \sum_{\vec{k}, \vec{q}} V_{IB}(\vec{q}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}. \quad (1.44)$$

We herhalen dat de eerste term in 1.35 de kinetische energie is van de mobiele impureit met bandmassa m . De tweede term van 1.30 beschrijft een gas vrije bosonen met massa m_B met kinetische energie $\epsilon_{\vec{q}}$. De derde term in 1.28 beschrijft interacties met boson-boson interactiepotentiaal $V_{BB}(\vec{q})$ in 1.29. Ten slotte beschrijft de vierde term in 1.42 de koppeling met de impureit via de boson-impureit interactiepotentiaal $V_{IB}(\vec{q})$ in 1.41.

2 Het polaron na Bogoliubov transformatie

2.1 Condensaat versus excitaties

In sectie 1.5 geeft het toevoegen van de geladen impureiteit aan het interagerend Bose gas aanleiding tot het geladen Bose polaron. De impureiteit interageert met het Bose gas waardoor de veeldeeltjes golffunctie

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\text{interacties}} |\Psi'\rangle, \quad (2.1)$$

geen ontbinding meer heeft in de veeldeeltjes bezettingsgetallen representatie. Zijn de interacties klein, voldoen we nog aan het Penrose-Onsager criterium. We kunnen de golffunctie na interacties $|\Psi\rangle$ dan benaderen door golffunctie van het condensaat

$$|\Psi'\rangle \approx |\Psi\rangle, \quad (2.2)$$

waardoor elk boson zich gedraagt alsof het dezelfde golffunctie heeft. De Bogoliubov shift [21] maakt dan een verschil tussen de gecondenseerde bosonen in de $\vec{k} = 0$ toestand en de geëxciteerde bosonen $\vec{k} > 0$. Op deze manier splitsen we de veeldeeltjes golffunctie als

$$|\Psi'\rangle = |\Psi\rangle + \text{fluctuaties}, \quad (2.3)$$

in de golffunctie van het condensaat plus de fluctuaties erbuiten. Door het Penrose-Onsager criterium is in het geval van condensatie de grondtoestand macroscopisch bezet ($N_0 \approx N_0 + 1 \approx N$), zodat de creatie en annihilatie van één boson in het condensaat

$$\begin{cases} \hat{a}_0^\dagger |N_0\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \\ \hat{a}_0 |N_0\rangle = \sqrt{N_0 - 1} |N_0 - 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \end{cases} \quad (2.4)$$

een klein effect heeft. De Bogoliubov benadering stelt dat inwerking van de tweede-kwantisatie operatoren $\hat{a}_0^\dagger$ en $\hat{a}_0$ hetzelfde effect heeft als een factor $\sqrt{N_0}$ toevoegen. Naar analogie met storingsrekening, nemen we de fluctuaties mee in de volgorde van perturbatie op het condensaat. We ontbinden de totale polaron Hamiltoniaan in vergelijking 1.44 in ordes van $\vec{q}$ tot op tweede orde. De grondtoestand $\vec{q} = 0$ krijgt dan betekenis voor de energie van het condensaat. De eerste orde in $\vec{q}$ heeft geen bijdrage door de aard van de interacties en de tweede orde ontbinding gebeurt in Tabel 2.1. De Hamiltoniaan van het vrij Bose gas uit 1.30 in de Bogoliubov benadering geeft

$$\hat{H}_B = \epsilon_0 N_0 + \sum_{\vec{q} \neq 0} \epsilon_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}. \quad (2.5)$$

De boson-boson interactie Hamiltoniaan uit 1.28 geeft

$$\hat{H}_{BB} = \frac{1}{2} N_0^2 V_{BB}(0) + \frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right) \left(\hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \right) - \frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) + N_0 V_{BB}(0) N_{exc}, \quad (2.6)$$

waarin

$$\left(\hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{q}} \hat{a}_{-\vec{q}} \right) = \left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right) \left(\hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \right) - 1. \quad (2.7)$$

Het interagerend Bose gas geeft samen met de mobiele impureiteit in 1.35 en de impureiteit-boson interacties uit 1.42 de totale polaron Hamiltoniaan 1.44 in tweede orde van $\vec{k}$:

$$\hat{H}_{IB} = N_0 V_{IB}(0) + \sqrt{N_0} \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{IB}(\vec{q}) \rho_I(\vec{q}) \left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right). \quad (2.8)$$

Als we de condensaat energie buiten beschouwing laten, hebben we enkel bijdrage van de fluctuaties op het condensaat, gegeven door de excitatie Hamiltoniaan

$$\hat{H}_{exc} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right) \left(\hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \right) + \sum_{\vec{q} \neq 0} \epsilon_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} + \sqrt{N_0} \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{IB}(\vec{q}) \rho_I(\vec{q}) \left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right). \quad (2.9)$$

2.2 Bogoliubov transformatie

De Bogoliubov *shift* komt neer op een energie shift $\varepsilon_{\vec{q}} \rightarrow \varepsilon'_{\vec{q}}$ van tweede kwantisatie creatie/annihilatie operatoren $\hat{a}_{\vec{q}}^{\dagger}$ en $\hat{a}_{\vec{q}}$ (zie vergelijking 1.30) naar nieuwe verschoven creatie/annihilatie operatoren $\hat{\alpha}_{\vec{q}}^{\dagger}$ en $\hat{\alpha}_{\vec{q}}$. Deze nieuwe tweede-kwantisatie operatoren met $\vec{q} \neq 0$ definiëren we als Bogoliubov quasi-deeltjes of Bogoliubov excitaties. De Bogoliubov *transformatie* tussen eerste kwantisatie operatoren voor de positie $\hat{Q}_{\vec{q}}$ en momentum $\hat{P}_{\vec{q}}$ is gekend uit de kwantummechanica van bosonische harmonische oscillatoren [1]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{Q}_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_{\vec{q}}}} (\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^{\dagger}) = \hat{Q}_{-\vec{q}}^{\dagger} \\ \hat{P}_{\vec{q}} = i\sqrt{\frac{\varepsilon_{\vec{q}}}{2}} (\hat{a}_{\vec{q}} - \hat{a}_{-\vec{q}}^{\dagger}) = \hat{P}_{-\vec{q}}^{\dagger} \end{array} \right. \xrightarrow{\varepsilon_{\vec{q}} \rightarrow \varepsilon'_{\vec{q}}} \left\{ \begin{array}{l} \hat{Q}_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon'_{\vec{q}}}} (\hat{\alpha}_{\vec{q}} + \hat{\alpha}_{-\vec{q}}^{\dagger}) = \hat{Q}_{-\vec{q}}^{\dagger} \\ \hat{P}_{\vec{q}} = i\sqrt{\frac{\varepsilon'_{\vec{q}}}{2}} (\hat{\alpha}_{\vec{q}} - \hat{\alpha}_{-\vec{q}}^{\dagger}) = \hat{P}_{-\vec{q}}^{\dagger} \end{array} \right. . \quad (2.10)$$

Uit deze theorie volgt expliciet dat de energieshift, gegeven door

$$\frac{1}{2}N_0V_{BB}(\vec{q})2\varepsilon_{\vec{q}}\hat{Q}_{\vec{q}}\hat{Q}_{\vec{q}}^{\dagger} + \frac{1}{2}\left[\hat{P}_{\vec{q}}\hat{P}_{\vec{q}}^{\dagger} + (\varepsilon_{\vec{q}})^2\hat{Q}_{\vec{q}}\hat{Q}_{\vec{q}}^{\dagger}\right] = \frac{1}{2}\left[\hat{P}_{\vec{q}}\hat{P}_{\vec{q}}^{\dagger} + (\varepsilon'_{\vec{q}})^2\hat{Q}_{\vec{q}}\hat{Q}_{\vec{q}}^{\dagger}\right], \quad (2.11)$$

een gevolg is van boson-boson $\vec{q} \neq 0$ interacties mee te nemen in de energie $\varepsilon'_{\vec{q}}$. Vergelijking 2.11 vertaald in tweede kwantisatie,

$$\frac{1}{2}N_0V_{BB}(\vec{q})\left(\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^{\dagger}\right)\left(\hat{a}_{-\vec{q}} + \hat{a}_{\vec{q}}^{\dagger}\right) + \varepsilon_{\vec{q}}\hat{a}_{\vec{q}}^{\dagger}\hat{a}_{\vec{q}} = \varepsilon'_{\vec{q}}\hat{\alpha}_{\vec{q}}^{\dagger}\hat{\alpha}_{\vec{q}}, \quad (2.12)$$

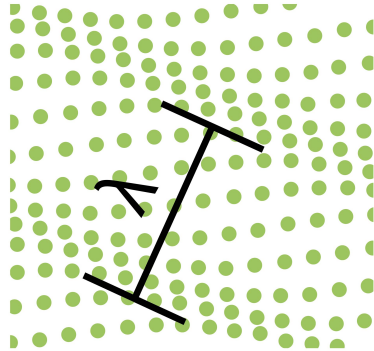
laat zien waarom het systeem beschrijven in Bogoliubov operatoren eenvoudiger is. Als gevolg herdefiniëren we de energie zodat de nieuwe energieniveaus,

$$\varepsilon'_{\vec{q}} = \sqrt{\varepsilon_{\vec{q}}[\varepsilon_{\vec{q}} + 2N_0V_{BB}(\vec{q})]}, \quad (2.13)$$

de Bogoliubov dispersie volgen. Deze dispersie is systeemspecifiek. Voor het Bose polaron gebruiken we in ons geval $\varepsilon_{\vec{q}}$ uit vergelijking 1.30 en $V_{BB}(\vec{q})$ uit vergelijking 1.29 zodat de Bogoliubov dispersie uitkomt op

$$\varepsilon'_{\vec{q}} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}\right)^2 + 2N_0 \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B A} \frac{\hbar q}{2m_B}} = \frac{\hbar^2 q}{2m_B} \sqrt{q^2 + \frac{2}{\xi^2}}, \quad (2.14)$$

waarin we de healing lengte uit 1.34 hebben herkend in de laatste stap.



Figuur 2.1: Fonen gevormd door de dichtheidsoscillaties van het Bose gas koppelen met de onzuiverheid.

Fluctuaties met lage energie,

$$\lim_{q \ll \xi} \varepsilon'_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q}{2m_B \xi} = c q, \quad (2.15)$$

volgen een lineaire Bogoliubov dispersie. Het condensaat wordt gebogen over een grotere schaal dan de healing lengte $\lambda \gg \xi$. Als gevolg verplaatst een fluctuatie in het condensaat zich met geluidssnelheid c , gegeven door de richtingscoëfficiënt van de dispersie. Een laag energetische Bogoliubov excitatie stelt dan een kwanta of fonon voor in de dichtheidsoscillatie van het condensaat. Fluctuaties met hoge energie,

$$\lim_{q \gg \xi} \varepsilon'_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_B}, \quad (2.16)$$

volgen een kwadratische Bogoliubov dispersie. Het condensaat kan de opgelegde frequentie niet volgen en moet buigen over een kleinere schaal dan de healing lengte $\lambda \ll \xi$. Een hoog energetische Bogoliubov excitatie stelt dan een boson voor dat geëxciteerd wordt uit het condensaat naar thermisch niveau $\vec{q} > 0$.

De overgang van regime 2.15 naar 2.16 gebeurt wanneer de dichtheid van het Bose gas zo sterk oscilleert dat deze niet meer Fourier-ontbonden kan worden in fononen. Dat de Fourier ontbinding faalt, is iets dat voorkomt in vaste stoffen bij de rand van de eerste Brillouin zone. De roosterparameter veroorzaakt een limiet waar hoogfrequente oscillaties als staande golven worden beschreven: de snelheid convergeert naar nul, de oscillatie lokaliseert en de dispersiecurve vlakkt af.

In de grondtoestand van de harmonische opsluitingspotentiaal is de bewegingssnelheid van de geladen impureiteit veel groter dan de geluidssnelheid in het condensaat [14], waardoor de impureiteit enkel koppelt met het deeltjeskarakter van de Bogoliubov excitaties. Het is deze koppelingsterm waar het polaronisch effect naar voren komt. Door de boson-impureiteit interactie in 2.8 te transformeren naar Bogoliubov operatoren, krijgen we een extra factor $\sqrt{\varepsilon_{\vec{q}}/\varepsilon'_{\vec{q}}}$ in de som. De Bogoliubov excitaties interageren met de impureiteit via een nieuwe interactiepotentiaal

$$V_{\vec{q}} = \sqrt{N_0} V_{IB}(\vec{q}) \sqrt{\frac{\varepsilon_{\vec{q}}}{\varepsilon'_{\vec{q}}}} = \sqrt{N_0} V_{IB}(\vec{q}) \left(\frac{(\xi q)^2}{(\xi q)^2 + 2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (2.17)$$

Na verandering van variabele $\sum_{\vec{q} \neq 0} \rightarrow \sum_{\vec{k}}$ krijgen we de totale excitatie Hamiltoniaan in vergelijking 2.9 na Bogoliubov transformatie

$$\hat{H}_{\text{exc}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \varepsilon'_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \rho_I(\vec{k}) \left(\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger \right). \quad (2.18)$$

De eerste term in de som blijft onveranderd na Bogoliubov shift. De tweede term heeft de betekenis van een vrij gas Bogoliubov excitaties op dezelfde manier dat $\sum_{\vec{k}} \varepsilon'_k \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k$ een set ongekoppelde harmonische oscillatoren voorstelt met ladderoperatoren $\hat{\alpha}_k^\dagger$ en $\hat{\alpha}_k$. De derde term brengt de interactie met de impureiteit nog in rekening waar de impureiteit een Bogoliubov excitatie emitteert of absorbeert.

Het resultaat in vergelijking 2.18 kan afgebeeld worden op de Fröhlich Hamiltoniaan in vergelijking 1.6. De Bogoliubov excitaties nemen de rol over van de fononen terwijl de impureiteit de rol overneemt van het elektron. Daarnaast zijn alle vectoren nu tweedimensionaal. We kunnen deze afbeelding enkel maken in het geldigheidsgebied van de Bogoliubov benadering waar we o.a. stellen dat de energie laag genoeg is zodat de Bogoliubov excitaties niet interageren met elkaar. Daarnaast zouden we *beyond*-Fröhlich termen [35] moeten toevoegen bij sterke impureiteit-boson koppeling.

Dat het geladen Bose polaron afgebeeld kan worden op een Hamiltoniaan die ook het akoestisch polaron beschrijft, betekent niet dat het energieverloop ook hetzelfde is. Voor akoestische polaronen geeft de rand van de eerste Brillouin zelfs aanleiding tot een afkap-waarde k_0 in de fonon ruimte voor berekeningen van de polaron energie [34].

$\vec{k}' - \vec{q}$	$\vec{k} + \vec{q}$	$\vec{k}'$	$\vec{k}$	B-B interactieterm	$\vec{k} - \vec{q}$	$\vec{k}$	I-B interactieterm
0	0	0	0	$\frac{1}{2} N_0^2 V_{BB}(0)$	0	0	$N_0 V_{IB}(0) \rho_I(0)$
		0	0	$\frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger$	0		$\sqrt{N_0} \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{IB}(\vec{q}) \rho_I(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{q}}$
0		0		$\frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}$		0	$\sqrt{N_0} \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{IB}(\vec{q}) \rho_I(\vec{q}) \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger$
	0		0	$\frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}}$			
0	0			$\frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{q} \neq 0} V_{BB}(\vec{q}) \hat{a}_{\vec{q}} \hat{a}_{-\vec{q}}$			
0			0	$\frac{1}{2} N_0 V_{BB}(0) \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}$			
	0	0		$\frac{1}{2} N_0 V_{BB}(0) \sum_{\vec{k}' \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}$			

Tabel 2.1: Ontbinding van boson-boson (links) en impureiteit-boson (rechts) interacties tot op tweede orde in $\vec{k}$.

2.3 Polaronische koppelingssterkte

We zagen in sectie 1.1 dat voor een elektron in een rooster, de polaronische koppelingssterkte werd gegeven door α_{LO} . In deze sectie introduceerden we ook de regimes voor zwakke en sterke koppeling en wat deze betekenen voor het gedrag van de ladingsdrager. Voor een geladen impureiteit, zagen we in sectie 1.5 dat sterke koppeling overeenkomt met de impureiteit-boson koppeling op te drijven: g_{IB} verhogen lokaliseert de impureiteit in de interactiepotentiaal.

In tegenstelling tot het Fröhlich polaron, was het toevoegen van boson-boson interacties in sectie 1.4 essentieel. De interactieamplitude g_{BB} opdrijven heeft echter een tegengesteld effect aan g_{IB} in de zin dat het de lokalisatie van een polaron tegenwerkt. De healing lengte ξ wordt kleiner waardoor er meer bosonen zich kunnen plaatsen rond de geladen impureiteit met screening effect als gevolg: de effectieve lading van de impureiteit daalt voor bosonen op grotere afstand. Langs de andere kant belemmert een sterke boson-boson verstrooiing a_{BB} ook het vormen van een depletie in het condensaat waar de geladen impureiteit lokaliseert - iets dat we niet in rekening moesten nemen in het geval van roostervervorming.

Deze koppelingen samen met hun invloed op het gedrag van het geladen Bose polaron, worden vervat in de dimensieloze polaronische koppelingsconstante. Deze is in drie dimensies gegeven door [14]

$$\alpha^{3D} = \frac{(R^{3D})^4}{a_{BB} b^2 \xi}, \quad R^{3D} = \sqrt{\frac{2\mu a}{\hbar^2}}, \quad (2.19)$$

waarin μ de relatieve massa is tussen de Bogoliubov massa en de massa van de impureiteit, met

$$\mu = \frac{m m_B}{m + m_B}. \quad (2.20)$$

De polaronische koppelingsconstante α is dan zodanig opgesteld, dat wanneer we over het zwakke koppelingsregime spreken, we in de regio zitten waar

$$\alpha \ll 1. \quad (2.21)$$

[45] bestudeerde de benadering $\alpha \approx 2$ voor overgang naar sterk koppelingsregime in het geval van een geladen Bose polaron in drie dimensies. We verwachten door dimensiereductie dat deze overgang al bij lagere koppelingssterkte plaatsvindt.

Zoals in sectie 1.1 beschreven, kwam α_{LO} voor uit de storingsrekening van het Fröhlich polaron. Het energieprofiel van het elektron in een fonon vacuüm verlaagt, evenredig met α_{LO} na invoeren van een bad longitudinaal optische fononen. We verwachten α in het algemeen ook terug te vinden in de storingsrekening van de vrije energie. We kunnen α dan zien als reactiviteit door de ratio van de energieverandering ΔE over de energie ε van de bosonen die deze induceert:

$$\frac{\Delta E}{\varepsilon} = \alpha. \quad (2.22)$$

Deze uitdrukking heeft veel weg van hoe de polariseerbaarheid van een medium gedefiniëerd wordt. Het is ook op deze manier dat α_{LO} werd bepaald op vergelijking 1.3.

Hoe parameters zoals polaron massa, straal en vrije energie zich gedragen in functie van α kan ons iets bijleren over het koppelingsregime waar het polaron zich in bevindt, meer bepaald waar de regio van sterke koppeling begint. De variationele Feynman padintegraal methode is hiervoor uitermate geschikt omdat de resultaten geldig blijken te zijn voor elke waarde van α . Dit is in tegenstelling tot bijvoorbeeld storingsrekening waar de berekeningen moeilijker worden wanneer we hogere ordes van α moeten meenemen om sterkere koppeling te beschrijven.

3 Variationele Feynman padintegraal methode

In het begin van dit hoofdstuk verantwoorden we waarom we de Feynman padintegraal methode mogen gebruiken, een methode die de klassieke oplossing favoriseert, voor een systeem dat zó ontaard is als een Bose-Einstein condensaat. We stellen in sectie 3.1 vast dat de energie van het exact systeem niet te berekenen valt door de complexiteit van de padintegraal. Als benadering hiervoor bekijken we in sectie 3.2 het modelsysteem van Feynman waarbij de energie eenvoudig te bepalen is. Dit geeft aanleiding tot de Jensen-Feynman vergelijking, die in de rest van dit hoofdstuk wordt gepreciseerd voor het specifiek geval van een Rubidium ion in een tweedimensionaal Rubidium condensaat.

We hebben gezien in hoofdstuk 2 dat de Hamiltoniaan van een interagerend Bose gas $\hat{H}_B + \hat{H}_{BB}$ kan beschreven worden als een gas niet-interagerende quasi-deeltjes $\sum_{\vec{k}} \epsilon'_k \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}}$. We kunnen dan alle resultaten van het ideaal gas hergebruiken, mits een aanpassing van de dispersierelatie $\epsilon_{\vec{k}} \rightarrow \epsilon'_k$ in vergelijking 2.14. De bezettingsgraad van energieniveau $\vec{k}$ volgt dus zo een Bose-Einstein verdeling

$$n_{\vec{k}} = n^B(\epsilon'_k) = \frac{1}{\exp(\epsilon'_k/k_B T) - 1}. \quad (3.1)$$

In de ultra-koude limiet $T \rightarrow 0$ is de exponent groot zodat we de -1 kunnen verwaarlozen. In dit geval is

$$n_{\vec{k}} \approx \exp(-\epsilon'_k/k_B T) \ll 1, \quad (3.2)$$

wat dan overeenkomt met een lage bezettingsgraad of een regime van klassieke deeltjes. Het Bogoliubov gas op een temperatuur $T > 0$ krijgt zo een statistische onzekerheid. Het is een aanname van de statistische fysica dat in thermisch evenwicht elke toestand met dezelfde energie even waarschijnlijk is. Deze kans is dan Boltzmann verdeeld, zoals te zien in vergelijking 3.2.

Het Bogoliubov gas brengen naar een eindige temperatuur heeft hetzelfde effect als een impuriteit toevoegen aan een ultra-koud Bogoliubov gas, namelijk thermalisatie naar een nieuw evenwicht. Door interactie van van de Bogoliubov excitaties mengen de pure kwantumtoestanden zich met die van de impuriteit. De golf functies koppelen zodat de energieniveaus $\epsilon'_k \rightarrow E_k$ die voldoen aan de Schrödingervergelijking van het geladen Bose polaron,

$$\hat{H}_{exc} |\psi_{\vec{k}}\rangle = E_{\vec{k}} |\psi_{\vec{k}}\rangle, \quad (3.3)$$

niet meer bekend zijn. We kunnen nog wel observabelen van het systeem uitrekenen: niet exact maar wel de verwachtingswaarde hiervan via een kansverdeling. De thermische dichtheidsmatrix [35],

$$\hat{\rho}_{th} = \sum_{\vec{k}} \exp(-E_k/k_B T) |\psi_{\vec{k}}\rangle \langle \psi_{\vec{k}}|, \quad (3.4)$$

brenkt deze kansen in rekening zoals een kansverdeling dit doet. De verwachtingswaarde van een observabele $\hat{A}$ wordt berekend door over te gaan naar de positie representatie

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Tr}[\hat{A} \hat{\rho}_{th}]}{\text{Tr}[\hat{\rho}_{th}]} = \frac{\int A \rho_{th}(\vec{x}|\vec{x}) d\vec{x}}{\int \rho_{th}(\vec{x}|\vec{x}) d\vec{x}}, \quad (3.5)$$

waarbij we de normering van de kansverdeling vinden door het spoor te nemen van de thermische dichtheidsmatrix. Dit is tevens de toestandssom

$$Z = \sum_{\vec{k}} \exp(-E_k/k_B T) \quad (3.6)$$

over een canonisch ensemble van Bogoliubov excitaties dat energie uitwisselt met de impuriteit als omgeving. We nemen hierbij aan dat de Bogoliubov excitaties voldoende ‘plaats’ hebben zodat één excitatie in één geëxciteerde kwantumtoestand past. Uit de aanname dat we met een niet-ontaard of klassiek systeem werken, volgt dat we de Boltzmann verdeling mogen gebruiken.

Uit vergelijking 3.6 is de gekende formule voor de vrije energie $F = -k_B T \ln(Z)$ af te lezen. Nu geldt dat de dichtheidsmatrix in de in positierepresentatie gelinkt is aan de tijdsimaginaire propagator K via een Wick-rotatie $t = -i\hbar\beta$ uit te voeren

$$\hat{\rho}_{th}(\vec{x}_b|\vec{x}_a) = K(\vec{x}_b, t = i\hbar\beta|\vec{x}_a, 0), \quad (3.7)$$

waarin $\beta = (k_B T)^{-1}$ de inverse temperatuur is. We herhalen dat een propagator alle paden van beginpunt $\{x_a, t_a\}$ naar eindpunt $\{x_b, t_b\}$ meeneemt in een padintegraal door te sommeren over alle kwantummechanische amplitudes. Deze amplitudo is de fasefactor $e^{i\theta}$ dat een deeltje op zo'n pad $x(t)$ verzamelt. Naar aanleiding van het eerste postulaat van de kwantummechanica is de fase gelijk aan $\theta = S[x(t)]/\hbar$, met S de systeemspecifieke actiefunctionaal van het pad. De propagator

$$K(x_b, t_b|x_a, t_a) = \int_{\{x_a, t_a\}}^{\{x_b, t_b\}} \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right) \quad (3.8)$$

sommeert dan over alle paden met gewicht afhankelijk van de actie van het systeem. Het principe van minste actie stelt dat het klassieke pad $x_{cl}(t)$ een extremum geeft van de actiefunctionaal. Het principe wordt ook afgebeeld in Figuur 3.1 waar de klassieke actie als minimum S_{min} is aangeduid. Zitten we op het klassieke pad, dan leidt het verschil $\eta(t)$ maar tot een klein verschil in de actiefunctionaal. Deze is in eerste orde van η gelijk aan nul:

$$\delta S = S[x_{cl} + \eta(t)] - S[x_{cl}] = 0, \quad (3.9)$$

zodat het faseverschil tussen de paden $\delta\theta$ ook nul is in eerste orde. Omdat het faseverschil tussen de paden zo klein is, interfereren ze constructief in vergelijking 3.8 naar een duidelijke voorkeursrichting - de klassieke actie. Zitten we niet op het klassieke pad, dan leidt het verschil $\eta(t)$ tot een merkbaar verschil in actiefunctionaal. Is het faseverschil $\delta\theta$ kleiner dan 2π dan is er nog steeds een voorkeursrichting merkbaar - de fuzziness op de klassieke actie. Voor een exotisch pad reikt de fase nog verder en zal deze destructief beginnen te interfereren. We herhalen dat de padintegraal zo is opgesteld dat de actie van het klassieke pad naar boven komt als oplossing, dewelke op een kwantummechanische fuzziness $\delta S/\hbar = 2\pi$ nauwkeurig bepaald kan worden.

Via substitutie van vergelijking 3.7 in 3.5 kunnen we de kwantumstatistische verwachtingswaarde uitrekenen van een padafhankelijke functionaal $A[x(\tau)]$ via de *padintegraal* methode

$$\langle A[x(\tau)] \rangle_S = \frac{1}{Z} \int d\vec{x} \int_{\{\vec{x}, 0\}}^{\{\vec{x}, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' A[\vec{x}'(\tau)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S[\vec{x}'(\tau)]\right). \quad (3.10)$$

De functionaal $A[x(\tau)]$ wordt hier gewogen met de kansverdeling $\exp(-S[x(\tau)]/\hbar)$. Door de vorm van de kansverdeling wordt de bijdrage aan de padintegraal van paden $x(\tau)$ die sterk afwijken van het klassieke pad exponentieel onderdrukt. We merken hierbij op dat indien het minimum van de actie niet exact bepaald is, dat deze onzekerheid ook wordt meegenomen in de kansverdeling zoals Figuur 3.2 aangeeft.

De verwachtingswaarde van $A[x(\tau)]$ is uiteraard systeemspecifiek via de actie S - aangeduid met subscript. De buitenste integraal wordt genomen over oppervlakte A van het tweedimensionaal systeem. De toestandssom kan ook via de padintegraal methode berekend worden op

$$Z = \int d\vec{x} \int_{\{\vec{x}, 0\}}^{\{\vec{x}, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S[\vec{x}'(\tau)]\right). \quad (3.11)$$

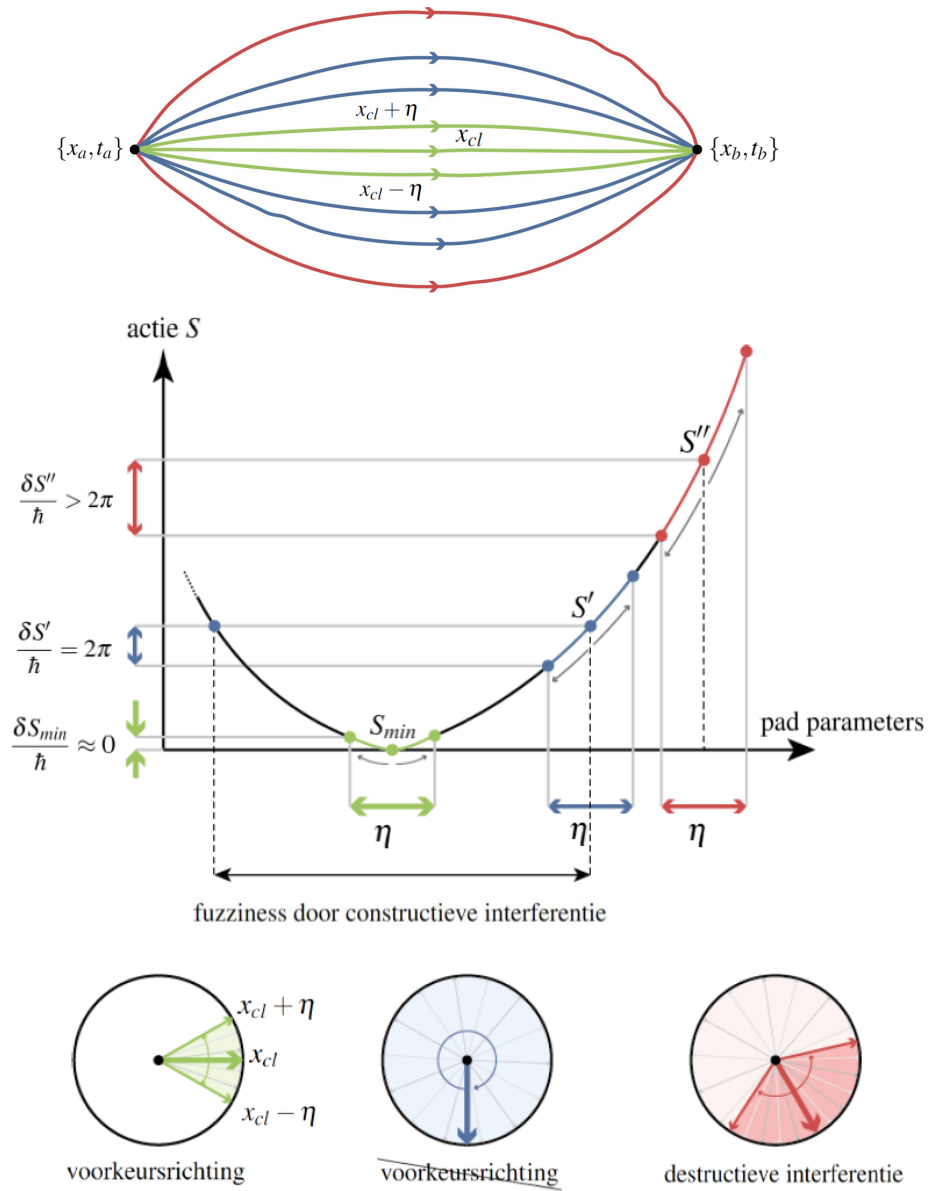
Door de Wick rotatie wordt de actie getransformeerd naar de Euclidische actie

$$S[\vec{x}'(\tau)] = \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \mathcal{L}[\vec{x}, \dot{\vec{x}}] d\tau, \quad (3.12)$$

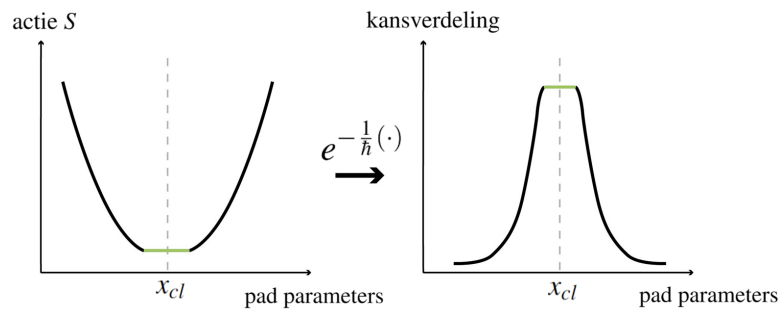
waar de Langrangiaan nu berekend wordt door de potentiële energie plus kinetische energie. We trachten in sectie 3.1 de grondtoestandsenergie van een geladen Bose polaron te berekenen door eerst de vrije energie uit de partitiesom

$$Z = e^{-\beta F}, \quad (3.13)$$

uit te rekenen, om dan de limiet $T \rightarrow 0$ te nemen. Hiervoor moeten we eerst de actie bepalen.



Figuur 3.1: Door constructieve interferentie (onder) komt de actie $S[x_{cl}]$ (midden) van het klassieke pad (boven) naar voor als oplossing in de padintegraal in vergelijking 3.8.



Figuur 3.2: Is het minimum van de actie niet eenduidig bepaald, dan wordt deze eigenschap meegenomen in de kansverdeling.

3.1 Actie van het Bose polaron

We vertrekken van de excitatie Hamiltoniaan in vergelijking 2.18. Hier kiezen we ook notatie $\varepsilon'_k = \hbar\omega_k$ te gebruiken in de plaats. Kies dan volgende transformatie naar eerste kwantisatie [37]

$$\begin{cases} \hat{Q}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_k}} [\hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger] = \hat{Q}_{-k}^\dagger \\ \hat{P}_k = -i\sqrt{\frac{M\hbar\omega_k}{2}} [\hat{\alpha}_k^\dagger - \hat{\alpha}_{-k}] = \hat{P}_{-k}^\dagger \end{cases} \quad (3.14)$$

waarbij we een Bogoliubov massa M hebben ingevoegd die later duidelijk wordt. De excitatie Hamiltoniaan [37] kan na transformatie

$$\hat{H}_{exc}(\vec{p}, \vec{r}, \{P_k, Q_k\}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[M\omega_k^2 \hat{Q}_k^2 + \frac{\hat{P}_k^2}{M} + 2\sqrt{\frac{2M\omega_k}{\hbar}} V_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{Q}_k \right] = \hat{H}_{vrij}(\vec{p}, \vec{r}) + \hat{H}_{GHO}(\vec{p}, \vec{r}, \{P_k, Q_k\}), \quad (3.15)$$

dan opgesplitst worden in de Hamiltoniaan met coördinaten voor de impureiteit, en een Hamiltoniaan afhankelijk van coördinaten van Bogoliubov modes plus een term die deze mengt. De Langrangiaan heeft dan dezelfde vorm voor de Euclidische actie

$$\mathcal{L}(\vec{r}, \vec{r}, \{\dot{Q}_k, Q_k\}) = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[\frac{M\omega_k^2}{2} \dot{Q}_k^2 + \frac{M}{2} \dot{Q}_k^2 + \sqrt{\frac{2M\omega_k}{\hbar}} V_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \dot{Q}_k \right] = \mathcal{L}_{vrij}(\vec{r}, \vec{r}) + \mathcal{L}_{GHO}(\vec{r}, \vec{r}, \{\dot{Q}_k, Q_k\}). \quad (3.16)$$

We zien dat de Langrangiaan splitst in een Langrangiaan voor een vrij deeltje in coördinaten $\vec{r}, \vec{r}$ en een set harmonische oscillatoren voor coördinaten $\{\dot{Q}_k, Q_k\}$, plus een mengterm die een drijfkraft voorstelt. Samen is dit een set gedreven harmonische oscillatoren. De actie komt uit op

$$S[\vec{r}(\tau), \{Q(\tau)_k\}] = \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \mathcal{L}(\vec{r}, \vec{r}, \{\dot{Q}_k, Q_k\}) d\tau = S_{vrij}[\vec{r}(\tau)] + S_{GHO}[\vec{r}(\tau), \{Q(\tau)_k\}]. \quad (3.17)$$

Hierdoor kan de toestandssom

$$Z = \int d\vec{r} \left(\prod_{\vec{k}} \int d\vec{Q}_k \right) \int_{\{\vec{r}, 0\}}^{\{\vec{r}, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{r}' \int_{\{\vec{Q}_k, 0\}}^{\{\vec{Q}_k, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{Q}_k \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S[\vec{r}'(\tau), \vec{Q}'_k(\tau)]\right) = Z_{GHO} \times Z_{vrij}, \quad (3.18)$$

ook gesplitst worden. De propagator en toestandssom van een gedreven harmonische oscillator is gekend. Door integratie over de coördinaten $\{\dot{Q}_k, Q_k\}$ elimineren we de vrijheidsgraden van de Bogoliubov excitaties. Uit de toestandssom is dan de actie af te lezen. De actie in vergelijking 3.17 komt dan uit op [19]

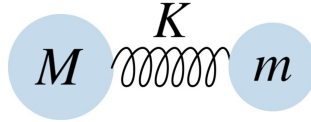
$$S = \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} d\tau - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_k|^2}{2\hbar} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_{\omega_k}(\vec{k}, |\tau - \sigma|) e^{i\vec{k}[\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]}. \quad (3.19)$$

De padintegraal in 3.19 is te moeilijk om uit te rekenen. Het stelt een polaron voor op een tijd τ dat met zichzelf interageert met een andere tijd σ . De geladen impureiteit interageert met de Bogoliubov excitaties en deze interageren vertraagd terug op de impureiteit via de Greense functie G_{ω_k} . De betekenis van de exacte toestandssom over deze Greense functie komt nog terug in sectie 3.3.

We onthouden dat door de ingewikkelde actie, we de energie van het geladen Bose polaron niet exact kunnen uitrekenen. We kunnen dit wel *benaderen* zoals Feynman dit heeft gedaan voor het Fröhlich polaron. Door de aard van de Fröhlich Hamiltoniaan kunnen we dezelfde oplossingsmethode gebruiken voor het geladen Bose polaron systeem.

3.2 Polaron energie en het modelsysteem

Wat is de eenvoudigste manier om een polaron effect te creëren? Feynman gaf het antwoord in zijn modelsysteem: twee massa's verbonden door een veer¹ (zoals weergegeven in Figuur 3.3). In deze sectie passen we het variationeel principe toe om de energie te benaderen. We stellen een energiefunctionaal op die geminimaliseerd wordt in ons exact systeem van een geladen Bose polaron. Dit is mogelijk volgens het principe van minste actie, waar de klassieke oplossing de actie minimaliseert. Berekenen we de energie van een ander systeem zal deze steeds hoger liggen dan de exacte (klassieke) oplossing. Het modelsysteem is een goede gok voor het geladen Bose polaron systeem in de zin dat de energie en actie hiervoor wel te berekenen zijn.



Figuur 3.3: Twee massa's verbonden door een veer: het modelsysteem van Feynman is de eenvoudigste manier om een polaron effect te creëren.

Nog beter is een modelsysteem met variationele parameters te gebruiken. De bovengrens minimaliseren in functie hiervan geeft de *minimale bovengrens* voor de energie, wat de nauwkeurigheid verhoogt². Het modelsysteem bestaat uit twee massa's: de massa m van de impureiteit en de "massa" van het Bogoliubov quasi-deeltje - onze eerste variationele parameter. Een veerconstante $K = MW^2$ koppelt dan de massa's waarin oscillatiefrequentie

$$W = \sqrt{\frac{K}{M}} \quad (3.20)$$

een mogelijke keuze is als tweede variationele parameter. Zo'n eenvoudig modelsysteem kan inderdaad polaron effecten geven. Zo vinden we het sterke koppelingsregime terug als we $M \rightarrow \infty$ nemen. De massa van de impureiteit is hier gelokaliseerd door de stijve veer aan de Bogoliubov massa. In de limiet $M \rightarrow 0$ gedraagt de impureiteit zich als een vrij deeltje: een karaktertrek van zwakke koppeling.

Stel Z de toestandssom van het exact systeem en Z_0 deze van het modelsysteem. De Jensen-Feynman ongelijkheid [49] maakt gebruik van het feit dat voor een concave functie zoals $Z = e^{-S/\hbar}$ geldt dat

$$\langle f(x) \rangle \geq f(\langle x \rangle). \quad (3.21)$$

Uit de padintegraal voorstelling van de toestandssom en de verwachtingswaarde in 3.11, resp. 3.10, volgt de Jensen-Feynman ongelijkheid

$$F \leq F_0 + \frac{1}{\hbar\beta} \langle S - S_0 \rangle_{S_0}, \quad (3.22)$$

die inderdaad een bovengrens geeft voor de vrije energie doordat de actie S van het exacte systeem lager ligt dan de actie S_0 van het modelsysteem. We merken nog op dat de verwachtingswaarde $\langle \dots \rangle_{S_0}$ uitgerekend wordt in het modelsysteem.

De Feynman methode voor neutraal Bose polaron werd in [19] al gebruikt voor drie dimensies, maar het loont om de vrije energie van het modelsysteem opnieuw volledig uit te rekenen in een tweedimensionaal systeem. De imaginaire-tijds Langrangiaan van het modelsysteem bestaat uit de vrije energie van de impureiteit en de variationele Bogoliubov massa, alsook de potentiële energie van de veer hiertussen via

$$\mathcal{L}_0(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, \vec{Q}, \dot{\vec{Q}}) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(\tau) + \frac{M}{2} \dot{\vec{Q}}^2(\tau) + \frac{K}{2} [\vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau)]^2, \quad (3.23)$$

waarbij $\vec{r}$ de vrijheidsgraden zijn voor de impureiteit en $\vec{Q}$ die van de Bogoliubov excitatie. We kunnen dit systeem ontkoppelen door transformatie naar het massacentrum coördinaat $\vec{R}$ en een relatieve coördinaat $\vec{x}$

$$\begin{cases} \vec{R}(\tau) = \frac{m\vec{r}(\tau) + M\vec{Q}(\tau)}{m + M} \\ \vec{x}(\tau) = \vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau) \end{cases}. \quad (3.24)$$

¹Opmerking van de auteur: Feynman was hier geniaal in zijn simpliciteit.

²Feynman berekende een bovengrens voor de energie via het variationele principe voor padintegralen [38] met resultaten "remarkably accurate" voor zwakke koppelingssterkte aan het energieverschil berekend via perturbatietheorie.

Het systeem ontkoppelt naar een vrij deeltje met totale massa $m + M$ in de massacentrumcoördinaat $\vec{R}$ plus een harmonisch oscillator met hoekfrequentie en gereduceerde massa, respectievelijk

$$\Omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}}, \quad \mu = \frac{mM}{m+M}, \quad (3.25)$$

in de relatieve coördinaat $\vec{x}$. We gebruiken Ω als alternatieve tweede variationele parameter in plaats van W . Gezien de Langrangiaan te splitsen is in deze twee delen

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0(\vec{R}, \vec{x}) &= \frac{m+M}{2} \dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{\vec{x}}^2 + \frac{K}{2} x^2 \\ &= \mathcal{L}_{\text{vrij}}(m+M, \vec{R}) + \mathcal{L}_{\text{HO}}(\Omega = \sqrt{K/\mu}, \vec{x}), \end{aligned} \quad (3.26)$$

geldt dit ook voor de actie van het systeem

$$\begin{aligned} S_0[\vec{x}(\tau), \vec{R}(\tau)] &= \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \mathcal{L}_0[\vec{x}, \dot{\vec{x}}, \vec{R}, \dot{\vec{R}}] d\tau \\ &= S_{\text{vrij}}[\vec{R}(\tau)] + S_{\text{H.O.}}[\vec{x}(\tau)]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

De toestandssom van het modelsysteem kan dan voorgesteld worden als een product van de toestandssom van het vrij deeltje en de toestandssom van de harmonische oscillator

$$\begin{aligned} Z_0 &= \int d\vec{x} \int d\vec{R} \int_{\{\vec{x},0\}}^{\{\vec{x},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' \int_{\{\vec{R},0\}}^{\{\vec{R},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{R}' \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_0[\vec{x}'(\tau), \vec{R}'(\tau)]\right) \\ &= \int d\vec{R} \int_{\{\vec{R},0\}}^{\{\vec{R},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{R}' \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{\text{vrij}}[\vec{R}'(\tau)]\right) \times \int d\vec{x} \int_{\{\vec{x},0\}}^{\{\vec{x},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_{\text{H.O.}}[\vec{x}'(\tau)]\right) \\ &= Z_{\text{vrij}}(m+M) \times Z_{\text{HO}}(\Omega = \sqrt{K/\mu}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

We berekenen deze uit het spoor van de thermische dichtheidsmatrix die we op zijn beurt vinden uit de tijdsimaginaire tijdspropagator. We rekenen eerst de tijdsimaginaire propagator uit van een tweedimensionaal vrij deeltje [39] met totale massa $m + M$ in massa-centrum coördinaat $\vec{R}$

$$K_{\text{vrij}}(\vec{R}(\hbar\beta), \hbar\beta | \vec{R}(0), 0) = \sqrt{\frac{m+M}{2\pi i \hbar (-i\hbar\beta - 0)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{m+M}{2} \frac{[\vec{R}(\hbar\beta) - \vec{R}(0)]^2}{(-i\hbar\beta - 0)}\right), \quad (3.29)$$

waarbij het beginpunt hetzelfde is gekozen als het eindpunt. Hieruit is het diagonaalelement van de thermische dichtheidsmatrix af te lezen als

$$\rho_{\text{vrij}}(\vec{R} | \vec{R}) = \frac{m+M}{2\pi \hbar^2 \beta}. \quad (3.30)$$

De toestandssom van het vrij deeltje wordt dan berekend door te integreren over het diagonaalelement van de dichtheidsmatrix over het oppervlak A :

$$Z_{\text{vrij}}(m+M) = \int_A d^2\vec{R} \rho_{\text{vrij}}(\vec{R} | \vec{R}) = A \frac{m+M}{2\pi \hbar^2 \beta}. \quad (3.31)$$

Op dezelfde manier vinden we uit de propagator van een harmonische oscillator met frequentie Ω en gereduceerde massa μ , gegeven door

$$\begin{aligned} K_{\text{HO}}(\vec{x}(\hbar\beta), \hbar\beta | \vec{x}(0), 0) &= \sqrt{\frac{\mu \Omega}{2\pi \hbar i \sin(\Omega(-i\hbar\beta - 0))}} \\ &\times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{\mu \Omega}{2} \frac{(\vec{x}^2(\hbar\beta) + \vec{x}^2(0)) \cos(\Omega(-i\hbar\beta - 0)) - 2\vec{x}(\hbar\beta) \vec{x}(0)}{\sin(\Omega(-i\hbar\beta - 0))}\right), \end{aligned} \quad (3.32)$$

dat het diagonaalelement van de thermische dichtheidsmatrix uitkomt op

$$\rho_{\text{HO}}(\vec{x} | \vec{x}) = \sqrt{\frac{\mu \Omega}{2\pi \hbar \sinh(\hbar\beta \Omega)}} \exp\left(-\frac{\mu \Omega}{\hbar} x^2 \tanh\left(\frac{\hbar\beta \Omega}{2}\right)\right). \quad (3.33)$$

Vergelijking 3.33 integreren over het oppervlak A geeft dan de toestandssom van de harmonische oscillator via

$$Z_{HO}(\Omega = \sqrt{K/\mu}) = \int_A d^2\vec{x} \rho_{HO}(\vec{x}|\vec{x}) = \frac{\mu\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\beta\hbar\Omega)} \frac{\pi}{\frac{\mu\Omega}{\hbar} \tanh\left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2}\right)} = \left(\frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\right)} \right)^2. \quad (3.34)$$

Omvormen van vergelijking 3.13 geeft uit de model-toestandssom de vrije energie van het modelsysteem

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_0) = -\frac{1}{\beta} [\ln(Z_{HO}) + \ln(Z_{vrij})]. \quad (3.35)$$

Substitutie van de toestandssommen uit vergelijkingen 3.34 en 3.31 rekent de vrije energie uit op

$$F_0 = \frac{2}{\beta} \ln \left(2 \sinh \left[\frac{\beta\hbar\Omega}{2} \right] \right) - \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{m+M}{2\pi\hbar^2\beta} A \right). \quad (3.36)$$

De grondtoestandsenergie van het modelsysteem wordt berekend door de ultra-koude limiet hiervan te nemen:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} F_0 = \frac{2}{\beta} \ln \left(\exp \left[\frac{\beta\hbar\Omega}{2} \right] \right), \quad (3.37)$$

$$E_0 = \hbar\Omega.$$

We zien dat deze voldoet aan de schalingsrelatie [40]

$$E_0^{2D} = \frac{2}{3} E_0^{3D}, \quad (3.38)$$

waar E^{3D} de grondtoestandsenergie is van het geladen Bose polaron is in een driedimensionaal systeem. We merken op dat de polaronische schalingsrelaties in vergelijking 3.38 en verder in 3.86 origineel zijn afgeleid voor een Fröhlich polaron waarbij de interactie amplitude $V_{\vec{k}}$ een homogene functie is [44], wat voor een geladen Bose polaron niet het geval is.

Het loont nu om de actie S_0 van het modelsysteem uit te rekenen tot deze in dezelfde vorm staat als de exacte actie. We vertrekken hiervoor opnieuw van de Langrangiaan van het modelsysteem in 3.23 voor transformatie naar nieuw coördinaatsstelsel. De methode van uitrekenen is gelijkaardig aan die voor de exacte actie S . De Langrangiaan

$$\mathcal{L}_0(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, \vec{Q}, \dot{\vec{Q}}) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(\tau) + \frac{M}{2} \dot{\vec{Q}}^2(\tau) + \frac{K}{2} [\vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau)]^2 = \mathcal{L}_{HO}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}) + \mathcal{L}_{GHO}(\dot{\vec{r}}, \dot{\vec{Q}}, \vec{r}, \vec{Q}) \quad (3.39)$$

splijt in een harmonische oscillator in coördinaten voor de impureiteit en een harmonische oscillator in coördinaten voor het Bogoliubov quasi-deeltje, plus een mengterm die een drijfkraft voorstelt. De laatste twee termen in 3.39 zijn dan samen te nemen als gedreven harmonische oscillator in coördinaten $\{\vec{Q}, \dot{\vec{Q}}\}$, gekoppeld met coördinaten $\{\vec{r}, \dot{\vec{r}}\}$ via de drijfkraft. Hierdoor kunnen we de model-actie splitsen

$$S_0[\vec{r}(\tau), \dot{\vec{r}}(\tau), \vec{Q}(\tau), \dot{\vec{Q}}(\tau)] = S_{HO}[\vec{r}(\tau)] + S_{GHO}[\vec{r}(\tau), \dot{\vec{Q}}(\tau)], \quad (3.40)$$

waardoor de model-toestandssom Z_0 ook factoriseert. In [19] werd de Bogoliubov coördinaat $\vec{Q}$ geëlimineerd waardoor de toestandssom

$$Z_0 = Z_{HO} \times Z_{GHO} = Z_{vrij} \times Z_{GHO} \quad (3.41)$$

ook factoriseert in de toestandssom van een vrij deeltje en een gedreven harmonische oscillator. De toestandssom van deze gedreven harmonische oscillator is berekend in [19]. Schrijven we deze toestandssom in de vorm zoals in vergelijking 3.11, dan is zijn actie af te lezen in de exponent. We gebruiken dit om de model-actie op te stellen

$$S_0 = \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(\tau) d\tau + \frac{MW^3}{8\hbar\beta} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_W(|\tau - \sigma|) [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]^2. \quad (3.42)$$

waarbij we de actie van een vrij deeltje hebben ingevuld.

3.3 Terug naar Jensen-Feynman voor de polaron energie

Nu we de ultra-koude energie hebben berekend, keren we terug naar de Jensen-Feynman vergelijking in 3.22. De actie S van het exacte systeem werd al gegeven in 3.19. De actie S_0 van het modelsysteem in 3.42 staat nu in dezelfde vorm als de exacte actie. Hierdoor valt de vrije deeltjes term via

$$S - S_0 = \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{2\hbar} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_{\omega_{\vec{k}}}(\vec{k}, |\tau - \sigma|) e^{i\vec{k}[\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]} - \frac{MW^3}{8\hbar\beta} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_W(|\tau - \sigma|) [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]^2, \quad (3.43)$$

in de Jensen-Feynman ongelijkheid. Nadat we de verwachtingswaarde in de integraal brengen, krijgen we

$$\frac{1}{\hbar\beta} \langle S - S_0 \rangle = -\frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{2\hbar} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_{\omega_{\vec{k}}}(\vec{k}, |\tau - \sigma|) \left\langle e^{i\vec{k}[\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]} \right\rangle_{S_0} - \frac{MW^3}{8\hbar\beta} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma G_W(|\tau - \sigma|) \left\langle [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]^2 \right\rangle_{S_0}. \quad (3.44)$$

Als we verder u substitueren voor het tijdsverschil $|\tau - \sigma|$, en verder gebruik maken van de identiteit

$$\int_{\tau=0}^{\hbar\beta} d\tau \int_{\sigma=0}^{\hbar\beta} d\sigma f(|\tau - \sigma|) = 2 \int_{u=0}^{\hbar\beta} (\hbar\beta - u) f(u), \quad (3.45)$$

wordt dit

$$F \leq F_0 - \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \int_{u=0}^{\hbar\beta} du (\hbar\beta - u) G_{\omega_{\vec{k}}}(\vec{k}, u) \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, u) - \frac{MW^3}{4\hbar\beta} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} du (\hbar\beta - u) G_W(\vec{k}, u) \left(-\nabla_{\vec{k}}^2 \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, u) \Big|_{\vec{k}=0} \right). \quad (3.46)$$

Hiervoor gebruiken we de **Greense functies van de Bogoliubov excitaties** [19], een meer algemene versie van de fonon Greense functie

$$G_{\omega_{\vec{k}}}(\vec{k}, u) = \frac{\cosh \left[\omega_{\vec{k}} \left(\frac{\hbar\beta}{2} - u \right) \right]}{\sinh \left[\omega_{\vec{k}} \frac{\hbar\beta}{2} \right]} = \frac{1}{2} n(\omega_{\vec{k}}) \left[e^{\omega_{\vec{k}} u} - e^{\omega_{\vec{k}}(\hbar\beta - |u|)} \right], \quad (3.47)$$

met n de dichtheidsfunctie [41] gegeven door

$$n(\omega_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\hbar\beta\omega_{\vec{k}}} - 1}. \quad (3.48)$$

Deze Greense functies zijn onafhankelijk van de dimensie [42]. We herkennen dezelfde vorm van de Bogoliubov Greense functie in

$$G_W(\vec{k}, u) = \frac{\cosh \left[W \left(\frac{\hbar\beta}{2} - u \right) \right]}{\sinh \left[W \frac{\hbar\beta}{2} \right]}. \quad (3.49)$$

In de berekening van de vrije energie komen ook volgende verwachtingswaarden naar voor die geëvalueerd zijn in het modelsysteem S_0

$$\left\langle e^{i\vec{k}[\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]} \right\rangle_{S_0} = \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, |\tau - \sigma|) = e^{-ak^2} \quad (3.50)$$

en

$$\left\langle [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]^2 \right\rangle_{S_0} = -\nabla_{\vec{k}}^2 \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, |\tau - \sigma|) \Big|_{\vec{k}=0} = 2a \times 2. \quad (3.51)$$

De factor 2 in de laatste term van 3.51 is te danken aan de gradiënt over twee dimensies te nemen. Hiervoor gebruiken we de **Greense functie van de impuriteit**

$$\mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, u) = \exp \left(-\frac{\hbar k^2}{2(m+M)} \left\{ u - \frac{1}{\beta\hbar} u^2 + \frac{M}{m} \frac{\cosh \left[\frac{\Omega\hbar\beta}{2} \right] - \cosh \left[\frac{\Omega\hbar\beta}{2} - u \right]}{\Omega \sinh \left[\frac{\Omega\hbar\beta}{2} \right]} \right\} \right). \quad (3.52)$$

Vergelijking 3.46 geeft dus de variationele bovengrens van de energie. We houden nog rekening dat we deze in termen van variationele parameters M en Ω kunnen schrijven door W om te zetten via de identiteit

$$\Omega^2 = W^2 \left(1 + \frac{M}{m} \right). \quad (3.53)$$

3.4 Jensen-Feynman in de ultra-koude limiet

We berekenen de ultra-koude limiet in elke term van vergelijking 3.46. De vrije energie van het modelsysteem werd in de ultra-koude limiet al berekend in vergelijking 3.37. De ultra-koude limiet van de Bogoliubov Greense functie uit 3.47 is

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_{\omega_{\vec{k}}}(\vec{k}, u) = \frac{\exp \left[\omega_{\vec{k}} \left(\frac{\hbar\beta}{2} - u \right) \right]}{\exp \left[\omega_{\vec{k}} \frac{\hbar\beta}{2} \right]} = e^{-\omega_{\vec{k}} u}. \quad (3.54)$$

Analoog krijgen we uit 3.49 dat

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} G_W(\vec{k}, u) = e^{-Wu}. \quad (3.55)$$

We hebben voor de Greense functie van de impureit uit 3.52 dat

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, u) &= \exp \left(-\frac{\hbar k^2}{2(m+M)} \left\{ u + \frac{M}{m} \left[\frac{\coth \left(\frac{\Omega \hbar \beta}{2} \right)}{\Omega} - \frac{\exp \left[-\Omega \left(u - \frac{\hbar\beta}{2} \right) \right]}{\Omega \exp \left[\frac{\Omega \hbar \beta}{2} \right]} \right] \right\} \right), \\ &= \exp \left(-\frac{\hbar k^2}{2(m+M)} \left\{ u + \frac{M}{m\Omega} (1 - e^{-\Omega u}) \right\} \right), \end{aligned} \quad (3.56)$$

De afgeleide van deze Greense functie in vergelijking 3.51 wordt in de ultra-koude limiet benaderd door

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} -\nabla_{\vec{k}}^2 \mathcal{F}_{\Omega}(\vec{k}, u) \Big|_{\vec{k}=0} = -\frac{2\hbar}{m+M} \left\{ u + \frac{M}{m\Omega} (1 - e^{-\Omega u}) \right\}. \quad (3.57)$$

We nemen nu het integrand van de integralen uit 3.37 samen. De Jensen-Feynman vergelijking 3.46 in de ultra-koude limiet komt zo uit op

$$F \leq F_0 - \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \mathcal{J}_1 - \frac{MW^3}{4\hbar\beta} \mathcal{J}_2, \quad (3.58)$$

waarin

$$\mathcal{J}_1 = \int_{u=0}^{\hbar\beta} du (\hbar\beta - u) \exp \left\{ -\omega_{\vec{k}} u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}, \quad (3.59)$$

en

$$\mathcal{J}_2 = - \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} du (\hbar\beta - u) e^{-Wu} \frac{2\hbar}{M+m} \left[\left(1 - e^{-\Omega u} \right) \frac{M}{m\Omega} + u \right]. \quad (3.60)$$

Wanneer we de ultra-koude limiet van vergelijkingen 3.59 en 3.60 nemen, krijgen we

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{J}_1}{\hbar\beta} = \int_{u=0}^{\hbar\beta} du \exp \left\{ -\omega_{\vec{k}} u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}, \quad (3.61)$$

en

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{J}_2}{\hbar\beta} &= -\frac{2\hbar}{M+m} \int_{u=0}^{\hbar\beta} du e^{-Wu} \left[\left(1 - e^{-\Omega u} \right) \frac{M}{m\Omega} + u \right] \\ &= -\frac{2\hbar}{M+m} \left[\frac{M}{m\Omega W} - \frac{M}{(W+\Omega)m\Omega} + \frac{1}{W^2} \right], \end{aligned} \quad (3.62)$$

respectievelijk. Dit kunnen vereenvoudigen door gebruik te maken van

$$\begin{aligned} -\frac{M}{(W+\Omega)m\Omega} + \frac{1}{W^2} &= \frac{m\Omega W + m\left(1 + \frac{M}{m}\right) - W^2 M}{W^2 m\Omega(W+\Omega)} \\ &= \frac{\Omega + W}{W\Omega(W+\Omega)} \\ &= \frac{1}{W\Omega}, \end{aligned} \quad (3.63)$$

waarbij we in de eerste stap alles op gelijke noemer hebben gezet en identiteit 3.53 hebben gebruikt. Substitutie van vergelijking 3.63 in 3.62 komt dan uit op

$$\begin{aligned} -\lim_{\beta \rightarrow \infty} -\frac{MW^3}{4\hbar\beta} \mathcal{J}_2 &= -\frac{MW^3\hbar}{2(M+m)} \left[\frac{M}{m} + 1 \right] \frac{1}{W\Omega} \\ &= -\frac{\hbar}{2} \frac{M}{(M+m)\Omega} W^2 \left[\frac{M}{m} + 1 \right] \\ &= -\frac{1}{2} \hbar \Omega \frac{M}{M+m}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Kijken we terug naar de Jensen-Feynman vergelijking uit 3.58, zien we dat uit identiteit

$$F_0 - \frac{MW^3}{4\hbar\beta} \mathcal{J}_2 = \frac{1}{2} \frac{M+2m}{M+m} \hbar\Omega. \quad (3.65)$$

opnieuw een schalingsrelatie naar boven komt. We hebben nu alle puzzelstukken voor de Jensen-Feynman vergelijking in de ultra-koude limiet:

$$F \leq \frac{1}{2} \frac{M+2m}{M+m} \hbar\Omega - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \int_{u=0}^{\hbar\beta} du \exp \left\{ -\omega_{\vec{k}} u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}. \quad (3.66)$$

Dit is dezelfde uitdrukking die gevonden werd in [43] indien we daar $\beta \rightarrow \infty$ nemen. Feynman berekende echter de nulpuntsenergie vanaf het punt waar $\Omega = W$:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} [F_0(\Omega) - F_0(\Omega = W)] = \hbar(\Omega - W). \quad (3.67)$$

Gebruiken we datzelfde nulpunt, krijgen we

$$\begin{aligned} F_0 - \frac{MW^3}{4\hbar\beta} \mathcal{J}_2 - \hbar W &= \frac{1}{2} \frac{M+2m}{M+m} \hbar\Omega - \hbar W \\ &= \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+M} - 1)^2}{M+1} \hbar\Omega \end{aligned} \quad (3.68)$$

waarin we alles hebben geschreven in termen van variationele parameters M en Ω . Uiteindelijk krijgen we voor de bovengrens van de grondtoestandsenergie in de ultra-koude limiet dat

$$E \leq \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+M} - 1)^2}{M+1} \hbar\Omega - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \int_{u=0}^{\infty} du \exp \left\{ -\omega_{\vec{k}} u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}. \quad (3.69)$$

We kunnen de som over $\vec{k}$ in vergelijking 3.69 nog wegwerken. Er is één $\vec{k}$ -vector per oppervlakte $(2\pi)^2/A$ in de reciproke ruimte. We nemen de continuümlimiet voor de som via

$$\sum_{\vec{k} \in \text{BZ}} \rightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int_A d^2\vec{k} = \frac{A}{2\pi} \int_{k=0}^{\infty} k dk \quad (3.70)$$

waarbij de hoek in de laatste stap al weg wordt geïntegreerd. Dit is mogelijk gezien de integrand in 3.69 hoekonafhankelijk is, wat een extra voorfactor 2π geeft. Vergelijking 3.71 is dus geldig voor een algemeen tweedimensionaal polaron die beschreven kan worden door de Fröhlich Hamiltoniaan:

$$E \leq \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+M} - 1)^2}{M+1} \hbar\Omega - \frac{A}{2\pi} \int_{k=0}^{\infty} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} k dk \int_{u=0}^{\infty} du \exp \left\{ -\omega_{\vec{k}} u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}. \quad (3.71)$$

3.5 Jensen-Feynman in dimensieloze eenheden

We geven nog een overzicht³ van de gebruikte parameters en hun eenheden in de tabellen hieronder. We kiezen ervoor om met lengte-eenheid ξ te werken en energie-eenheid ε_0 naar analogie met de karakteristieke lengte en energie in vergelijking 1.34. Als massa-eenheid kiezen we die van de onzuiverheid m . We stellen ook dat a , een parameter die voorkwam in context van de Van der Waal's coëfficiënt in 1.36, een andere eenheid heeft dan in drie dimensies [46]. We offeren één dimensie op door de healing-lengte ξ weg te delen in

$$\begin{aligned} a &= a^{3D} \frac{1}{\xi} \\ &= \tilde{a} \frac{\hbar^2 \xi}{m}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

waarbij $\tilde{a}$ de dimensieloze variant is van a . Door de keuze van a , moeten we de definitie van karakteristieke lengte uit vergelijking 1.39 ook aanpassen, zodat deze in lengte-eenheden blijft:

$$\begin{aligned} R &= R^{3D} \sqrt{\xi}, \\ &= \xi \sqrt{2 \left(\frac{\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B} \right)} \tilde{a}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

We passen verder de uitdrukking voor polaronische koppelingssterkte in 2.19 aan

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha^{3D} \frac{1}{\xi} \\ &= \frac{4}{a_{BB}} \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2 \left(\frac{\tilde{m}_B}{\tilde{m}_B + 1} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.74)$$

zodat deze dimensieloos blijft voor een tweedimensionaal systeem. De gevolgen van dimensie reductie op de kenmerken van de polaron zoals de energie en verstrooiingsparameter zijn gegeven in de tabellen hieronder. Hier zien we bijvoorbeeld dat de boson-boson verstrooiingsparameter a_{BB} dimensieloos is geworden.

parameter	eenheid	dimensieloze parameter	kenmerk polaron	eenheid
E	$\varepsilon_0 = \hbar^2 / (m \xi^2)$	$\tilde{E} = E / \varepsilon_0$	V_{IB}	ε_0
M	m	$\tilde{M} = M / m$	V_{BB}	ε_0
m_B	m	$\tilde{m}_B = m_B / m$	$g_{BB} = 4\pi \hbar^2 a_{BB} / m_B$	$\varepsilon_0 \xi^2$
Ω	$\omega_0 = \hbar / (m \xi^2)$	$\tilde{\Omega} = \Omega / \omega_0$	$g_{IB} = A V_{IB}$	$\varepsilon_0 \xi^2$
u	$1 / \omega_0$	$\tilde{u} = u \omega_0$	$a_{BB} = A / (8\pi N \xi^2)$	1
k	$1 / \xi$	$\tilde{k} = \xi k$	a/b	$\varepsilon_0 \xi^2$
b	ξ	$\tilde{b} = b / \xi$	$R = \sqrt{2\mu a \xi / \hbar^2}$	ξ
a	$\hbar^2 \xi / m$	$\tilde{a} = a m / (\hbar^2 \xi)$	$\alpha = R^4 / (a_{BB} b^2 \xi^2)$	1

Tabel 3.1: Parameters, eenheden en dimensieloze parameters van het polaron (links) en kenmerken van het polaron (rechts). Afwijkingen van het driedimensionaal geval zijn aangeduid in kleur.

Zoals de titel uitwijst, heeft deze sectie als doel de Jensen-Feynman ongelijkheid in 3.71 om te zetten in dimensieloze eenheden. Voor de eerste term in de som is dit makkelijk:

$$\frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+M}-1)^2}{M+1} \hbar \Omega = \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+\tilde{M}}-1)^2}{\tilde{M}+1} \tilde{\Omega} \varepsilon_0. \quad (3.75)$$

De tweede term in vergelijking 3.71 is van type

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\pi} \int_{k=0}^{\infty} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} k dk \int_{u=0}^{\infty} du f(k, u) &= \frac{A}{2\pi} \frac{\omega_0 \hbar}{\varepsilon_0} \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \frac{\tilde{k}}{\xi} d \left(\frac{\tilde{k}}{\xi} \right) \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} f(\tilde{k}, \tilde{u}) d \left(\frac{\tilde{u}}{\omega_0} \right) \\ &= \frac{A}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon_0 \xi^2} \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} |V_{\vec{k}}|^2 \tilde{k} d\tilde{k} \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} f(\tilde{k}, \tilde{u}) d\tilde{u}, \end{aligned} \quad (3.76)$$

³Deze sectie is behandeld op basis van [37].

waarin we de integrand voorstellen door

$$f(k, u) = \exp \left\{ -\omega_k u - \frac{\hbar k^2}{2(m+M)\Omega} \left[u\Omega + \frac{M}{m} (1 - e^{-u\Omega}) \right] \right\}. \quad (3.77)$$

We kunnen vergelijking 3.76 verder uitwerken door $|V_{\vec{k}}|^2$ uit vergelijking 2.17 te gebruiken samen met de voor-factoren van de integraal via

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\pi} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\epsilon_0 \xi^2} &= \frac{A}{2\pi \xi^2} N_0 \frac{g_{IB}^2(k)}{A^2} \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \frac{1}{\epsilon_0} \\ &= \frac{\pi^2}{16a_{BB}} \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} e^{-2\tilde{b}\tilde{k}} \epsilon_0, \end{aligned} \quad (3.78)$$

waar we het aantal gecondenseerde bosonen $N_0 \approx N$ hebben omgezet via de healing lengte ξ in 1.34. Om vergelijking 3.78 op te stellen, hebben we expliciet de interactie amplitude met definitie in vergelijking 1.41, uitgeschreven in dimensieloze coördinaten op

$$g_{IB}(k) = \frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \epsilon_0 \xi^2 \pi^2 e^{-\tilde{b}\tilde{k}}. \quad (3.79)$$

Wanneer we uitkomst 3.78 dan substitueren in vergelijking 3.76, komt de tweede term in de som van de Jensen-Feynman vergelijking in 3.71 naar voor via

$$\frac{A}{2\pi} \int_{k=0}^{\infty} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} k dk \int_{u=0}^{\infty} du f(k, u) = \frac{\pi^2}{16a_{BB}} \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2 \epsilon_0 \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \tilde{k} d\tilde{k} \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} e^{-2\tilde{b}\tilde{k}} f(\tilde{k}, \tilde{u}) d\tilde{u}. \quad (3.80)$$

We pakken nu de integrand $f(\tilde{k}, \tilde{u})$ aan in vergelijking 3.80. De eerste term in de exponent bevat de Bogoliubov dispersie die we hebben behandeld vergelijking 2.14. In dimensieloze eenheden komt dit uit op

$$\omega_k u = \frac{1}{\omega_0} \omega_k \omega_0 u = \frac{\tilde{k}}{2\tilde{m}_B} \sqrt{2 + \tilde{k}^2} \tilde{u}. \quad (3.81)$$

De tweede term in de exponent van $f(\tilde{k}, \tilde{u})$ is de ultra-koude geheugenfunctie van vergelijking 3.56. In dimensieloze eenheden wordt dit

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathcal{F}_{\tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})} \frac{1}{\tilde{\Omega}} \left\{ \tilde{u}\tilde{\Omega} + \tilde{M} (1 - e^{-\tilde{\Omega}\tilde{u}}) \right\} \right). \quad (3.82)$$

We zien in vergelijking 3.78 dat er een exponent bijkomt door interactie amplitude g_{IB} uit te schrijven. Het is handig om alle exponenten in de Jensen-Feynman vergelijking in 3.71 samen te nemen in

$$e^{-2\tilde{b}\tilde{k}} f(\tilde{k}, \tilde{u}) = \exp \left\{ -2\tilde{b}\tilde{k} - \frac{\tilde{k}}{2\tilde{m}_B} \sqrt{2 + \tilde{k}^2} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})\tilde{\Omega}} \left[\tilde{u}\tilde{\Omega} + \tilde{M} (1 - e^{-\tilde{\Omega}\tilde{u}}) \right] \right\}. \quad (3.83)$$

Substitutie hiervan in vergelijking 3.80 geeft dan de tweede term in de Jensen-Feynman vergelijking. Na het buitenzetten van energie eenheid ϵ_0 hebben we nu 3.71 volledig herschreven in dimensieloze parameters:

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\tilde{\Omega}, \tilde{M}) &\leq \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1 + \tilde{M}} - 1)^2}{\tilde{M} + 1} \tilde{\Omega} - \frac{\pi^2}{16a_{BB}} \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2 \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\sqrt{2 + \tilde{k}^2}} \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} d\tilde{u} \\ &\quad \times \exp \left\{ -2\tilde{b}\tilde{k} - \frac{\tilde{k}}{2\tilde{m}_B} \sqrt{2 + \tilde{k}^2} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})\tilde{\Omega}} \left[\tilde{u}\tilde{\Omega} + \tilde{M} (1 - e^{-\tilde{\Omega}\tilde{u}}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.84)$$

We zien dat de bovengrens van de grondtoestand energie, naast de variationele parameters $\tilde{\Omega}$ en $\tilde{M}$, nog afhankelijk is van de dimensieloze parameters $\tilde{a}$ en $\tilde{b}$ die te maken hebben met de geometrie van de impureit-boson potentiaalput. Daarnaast het kunnen we expliciet het effect van de polaronische koppelingsconstante bekijken in de grondtoestandsenergie. We

gebruiken vergelijking 3.74 om α in de Jensen-Feynman ongelijkheid te brengen

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\tilde{\Omega}, \tilde{M}) \leq & \frac{2}{3} \left[\frac{3}{4} \frac{(\sqrt{1+\tilde{M}}-1)^2}{\tilde{M}+1} \tilde{\Omega} - \frac{\pi}{32} \frac{3\pi}{4} \alpha \left(\frac{1+\tilde{m}_B}{\tilde{m}_B} \right)^2 \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\sqrt{2+\tilde{k}^2}} \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} d\tilde{u} \right. \\ & \times \left. \exp \left\{ -2\tilde{b}\tilde{k} - \frac{\tilde{k}}{2\tilde{m}_B} \sqrt{2+\tilde{k}^2} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2(1+\tilde{M})\tilde{\Omega}} \left[\tilde{u}\tilde{\Omega} + \tilde{M} \left(1 - e^{-\tilde{\Omega}\tilde{u}} \right) \right] \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.85)$$

waarbij we een factor $2/3$ hebben buitengezet naar aanleiding van de schalingsrelatie in vergelijking 3.38. Daarnaast kunnen we de driedimensionale polaronische koppelingsconstante terugvinden door schalingsrelatie [40]

$$E^{2D}(\alpha) = \frac{2}{3} E^{3D} \left(\frac{3\pi}{4} \alpha \right) \quad (3.86)$$

te gebruiken als extensie van vergelijking 3.38. Hierbij merken we op dat een voorfactor $\pi/32$ voor α is gevonden [45] in het geval van sterke koppeling in drie dimensies.

3.6 Rubidium ion $^{87}\text{Rb}^+$ in een Rubidium ^{87}Rb condensaat

De tabellen in sectie 3.5 geven de parameters van het tweedimensionaal geladen Bose polaron. Tot nu toe hebben we bijvoorbeeld de waarde van de boson massa in het midden gelaten. Vanaf deze sectie preciseren we naar een $^{87}\text{Rb}^+ - ^{87}\text{Rb}$ systeem, waar het Rubidium ion de rol van de impuriteit speelt. Deze heeft dezelfde massa als de Rubidium atomen van het Bose gas waardoor de massa ratio gelijk is aan 1. De dimensieloze massa ratio voor een Rubidium ion in een Rubidium condensaat wordt getoond in Tabel 3.2, samen met andere systeemspecifieke parameters.

parameter	waarde
$\tilde{m}_B$	1
$n\xi^2$	$1/(2\pi)$
a_{BB}	$1/4$
α	$4(\tilde{a}/\tilde{b})^2$

Tabel 3.2: Parameters en waarden voor een $^{87}\text{Rb}^+ - ^{87}\text{Rb}$ systeem.

De boson golffunctie kan enkel gebogen worden over een lengte ξ in één dimensie ten gevolge van de boson-boson interacties. Voor een isotrope golffunctie volgt uit de stelling van Pythagoras dat dit een lengte $r = \sqrt{2}\xi$ inneemt in twee dimensies. De kleinste doos waar we een boson in 2 dimensies in kunnen opsluiten is daarom een doos met straal r . Het Bose gas is net niet ontaard wanneer de dichtheid

$$n = \frac{1}{(\sqrt{2}\xi)^2 \pi} \implies n\xi^2 = \frac{1}{2\pi}, \quad (3.87)$$

maximaal één boson per polaire oppervlakte $r^2\pi$ beschrijft. Deze aanname kwam ook voor in het begin van hoofdstuk 3 in de context van de canonische toestandssom Z . Door $n\xi^2 = 1/(2\pi)$ vast te leggen, vereenvoudigt de verstrooiingsparameter uit vergelijking 1.34 naar

$$a_{BB} = \frac{1}{8\pi n\xi^2} = \frac{1}{4}. \quad (3.88)$$

Invullen van a_{BB} en $\tilde{m}_B$ in vergelijking 3.84 geeft de bovengrens van de grondtoestandsenergie

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\tilde{\Omega}, \tilde{M}) \Big|_{\text{Rb}^+/\text{Rb}} \leq & \frac{1}{2} \frac{(\sqrt{1+\tilde{M}}-1)^2}{\tilde{M}+1} \tilde{\Omega} - \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2 \int_{\tilde{k}=0}^{\infty} d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\sqrt{2+\tilde{k}^2}} \int_{\tilde{u}=0}^{\infty} d\tilde{u} \\ & \times \exp \left\{ -2\tilde{b}\tilde{k} - \frac{\tilde{k}}{2} \sqrt{2+\tilde{k}^2} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2(1+\tilde{M})\tilde{\Omega}} \left[\tilde{u}\tilde{\Omega} + \tilde{M} \left(1 - e^{-\tilde{\Omega}\tilde{u}} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.89)$$

die nu naast de variationele parameters enkel nog afhankelijk is van parameters $\tilde{a}$ en $\tilde{b}$. De koppelingssterkte α uit vergelijking 3.74 komt na substitutie van $\tilde{m}_B$ en a_{BB} uit op

$$\alpha|_{Rb^+/Rb} = 4 \left(\frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \right)^2. \quad (3.90)$$

De koppeling is hierdoor enkel gelinkt aan de ratio $\tilde{a}/\tilde{b}$. Als gevolg, is vergelijking 3.89 eenvoudig in functie van α om te vormen. We moeten nakijken of deze parameters voldoen aan de Bogoliubov benadering. We zouden immers onze afbeelding op de Fröhlich Hamiltoniaan verliezen indien de boson-boson interacties te sterk zijn. In termen van de tweedimensionale verstrooiingsparameter a_{BB} geldt dat de benadering opgaat indien het verstrooiingsoppervlak $(a_{BB}\xi)^2$ kleiner is dan de oppervlakte $1/n$ ingenomen door één boson of

$$a_{BB} \xi n^{1/2} \ll 1. \quad (3.91)$$

Onze keuze voor $n\xi^2$ en a_{BB} in Tabel 3.2 zorgt ervoor dat we in het geldigheidsgebied van de Bogoliubov benadering werken.

Het resultaat van dit hoofdstuk is gegeven in vergelijking 3.89. Het is een vorm van de Jensen-Feynman ongelijkheid die ons toelaat de bovengrens te berekenen van de polaronische grondtoestandsenergie voor een Rubidium ion $^{87}\text{Rb}^+$ in een Bose-Einstein condensaat van Rubidium ^{87}Rb atomen. Deze werd zodanig opgesteld dat de energie nog afhankelijk is van variationele parameters. Hoe het minimaliseren met respect tot deze parameters de *kleinste* bovengrens geeft en hoe deze verandert in functie van de koppelingsconstante, wordt besproken in het volgende hoofdstuk. Daarnaast berekenen we de polaron straal en effectieve polaron massa waarvan het verloop ons een idee kan geven in welk koppelingsregime de energie zich bevindt.

4 Berekenen van de polaron massa, straal en energie

4.1 Polaron energie

Voor de minimale bovengrens van de grondtoestand energie $\tilde{E}(\tilde{\Omega}, \tilde{M})$ te berekenen van het $^{87}\text{Rb}^+ - ^{87}\text{Rb}$ systeem, minimaliseren we het rechterlid van vergelijking 3.89 met respect naar de van de variationele parameters $\tilde{\Omega}$ en $\tilde{M}$. Hiervoor gebruiken we de `fmincon` functie in MATLAB. Voor elke parameter $\tilde{a}$ en $\tilde{b}$ die we kiezen, vinden we dan een koppel $\{\tilde{\Omega}_{min}, \tilde{M}_{min}\}$ waarvoor $\tilde{E}$ minimaal is. Op deze manier zijn de minimaliserende variationele parameters afhankelijk van parameters $\tilde{a}$ en $\tilde{b}$, maar deze leggen ook een koppeling α vast via vergelijking 3.90.

Deze α -afhankelijkheid laat ons toe te bekijken hoe de variationele parameters veranderen verschillende de koppelings-regimes. We houden hierbij rekening dat de Feynman padintegraal methode ook opgaat voor sterke koppeling α , maar de Bogoliubov benadering niet. Om de variationele parameters af te beelden in functie van α , moeten we één parameter vast kiezen. Hier maken we de keuze

$$b = 0.1\xi, \quad (4.1)$$

zoals in [46]. Dit komt neer op het zoeken naar een (lokaal) minimum van het energie oppervlak in de ruimte opgespannen door de variationele parameters. Figuren 4.4 en 4.5 geven het energie oppervlak weer in de $(\tilde{M}, \tilde{\Omega})$ -ruimte voor verschillende waarden van α . Elke deelfiguur geeft een andere waarde van $\alpha \approx 0.01, 0.04, 4, 9$ waar het koppel van variationele parameters $\{\tilde{\Omega}_{min}, \tilde{M}_{min}\}$ de minimale bovengrens in energie $\tilde{E}_{min}$ vastlegt, aangeduid met een bolletje. Deze waarden worden bijgehouden in Tabel 4.1, samen met nog andere waarden van α die niet worden afgebeeld met een figuur.

α	$\tilde{a}/\tilde{b}$	$\tilde{b}$	$\tilde{\Omega}_{min}$	$\tilde{W}_{min}$	$\tilde{M}_{min}$	$\tilde{E}_{min}$
0.04	0.1	0.1	2.2653	2.2577	0.0067	-0.0292
1	0.5	0.1	2.4162	2.2206	0.1839	-0.7379
4	1	0.1	3.0634	2.1976	0.9432	-3.0459
9	1.5	0.1	4.4707	2.3406	2.6484	-7.1675
16	2	0.1	6.5331	2.6093	5.2690	-13.3443
25	2.5	0.1	9.0351	2.9170	8.5940	-21.7276
36	3	0.1	11.8480	3.2262	12.4870	-32.4067

Tabel 4.1: We berekenen voor inputwaarden $\tilde{a}/\tilde{b}$ en $\tilde{b}$ een koppel variationele parameters $\{\tilde{\Omega}_{min}, \tilde{M}_{min}\}$ die de minimale bovengrens in energie $\tilde{E}_{min}$ vastlegt op een specifieke koppeling α .

Hoe het oppervlakte verloop rond het minimum verandert ten gevolge van α wordt verduidelijkt in Figuur 4.6, waar we de energie oppervlakken samen afbeelden. Figuur 4.1 (boven) geeft het verloop van $\tilde{\Omega}_{min}$ en $\tilde{M}_{min}$ in functie van de koppelingssterkte α van Tabel 4.1. Figuur 4.3 geeft aan hoe α variëren het oplossingsgebied $\tilde{E}_{min}(\tilde{\Omega}_{min}, \tilde{M}_{min})$ bestrijkt. De minimaliserende variationele parameters zijn dan verzameld in Figuur 4.2. Hierbij zien we dat de polaronische grondtoestandsenergie steeds negatief is, wat duidt op een verlaging in energie bij polaronische effecten. De impureiteit kan met andere woorden steeds een gebonden toestand vinden door een depletie bubbel te maken in het condensaat. Dit staat in contrast met het geval van een neutrale impureiteit, maar is gelijkaardig aan het resultaat voor een elektron in een ionair of polair kristal [45].

Een close-up van Figuur 4.1 (onder) voor kleine α laat een sprong in het verloop van $\tilde{M}$ en Ω zien bij $\alpha \approx 0.1$. De variationele parameters lijken geen duidelijk bepaalde waarde te hebben in deze regio. We onderzoeken hoe het energie oppervlak zich gedraagt rond $\alpha \approx 0.1$ in Figuur 4.7 met nieuwe waarden in Tabel 4.2. Het energie oppervlak in Figuur 4.7 lijkt geen duidelijk bepaald minimum te hebben. Dit kan afkomstig zijn van het gedrag van de variationele parameters uit Figuur 4.1 (onder).

α	$\tilde{a}/\tilde{b}$	$\tilde{a}$	$\tilde{b}$	$\tilde{\Omega}_{min}$	$\tilde{W}_{min}$	$\tilde{M}_{min}$	$\tilde{E}_{min}$
0.00970	0.04925	0.004925	0.1	0.21146	0.21108	0.00360	-0.00708
0.00972	0.04930	0.004930	0.1	1.40716	1.40574	0.00202	-0.00701
0.00976	0.04940	0.004940	0.1	2.26347	2.26164	0.00162	-0.00713
0.00980	0.04950	0.004950	0.1	2.22864	2.22682	0.00164	-0.00716

Tabel 4.2: We berekenen voor inputwaarden $\tilde{a}/\tilde{b}$ en $\tilde{b}$ een koppel variationele parameters $\{\tilde{\Omega}_{min}, \tilde{M}_{min}\}$ die de minimale bovengrens in energie $\tilde{E}_{min}$ vastlegt. We kiezen inputwaarden zodat dit een koppelingsregio $\alpha \approx 0.1$ bestrijkt.

Daarnaast bekijken we de dimensieloze interactie amplitudes uit vergelijkingen 3.79 en 1.26, respectievelijk

$$\frac{g_{IB}(\vec{k})}{\epsilon_0 \xi^2} = \frac{\tilde{a}}{\tilde{b}} \pi^2 e^{-\tilde{b}\vec{k}}, \quad \frac{g_{BB}}{\epsilon_0 \xi^2} = \pi, \quad (4.2)$$

in functie van polaronische koppelingssterkte α in Figuur 4.8 voor $\vec{k} = 0, 1, 2, 3$.

4.2 Polaron massa

Bevinden we ons in het regime van zwakke koppeling, dan kan het polaron effect meegenomen worden in de polaron massa, naar aanleiding van de elektron band massa in vergelijking 1.6. De *effectieve* polaron massa wordt benaderd door [19]

$$m_{pol} = m \left(1 + \frac{M}{m} \right), \quad (4.3)$$

met dimensieloze equivalent

$$\tilde{m}_{pol}(\tilde{M}) = 1 + \tilde{M}. \quad (4.4)$$

Het verloop van de dimensieloze polaron massa $\tilde{m}_{pol}$ in Figuur 4.9 is dan hetzelfde als die van de variationele parameter M , afgebeeld in Figuur 4.1 in functie van polaronische koppelingssterkte α . Wanneer er geen koppeling is oftewel $\alpha = 0$, ontbreken de effecten van dichtheidsfluctuaties. Bijgevolg moet de impuriteit deze ook niet meeslepen in een effectieve polaron massa. Hierdoor geldt dat $\tilde{M} = 0$, wat ook te zien is op Figuur 4.9. Het is opmerkelijk dat ook voor een kleine koppeling, de effectieve massa sterk stijgt in functie van α . De grote effectieve polaron massa duidt op lokalisatie - een karaktertrek van sterke koppeling [45].

4.3 Polaron straal

We zagen in sectie 3.2 dat het polaron modelsysteem ontkoppelt naar een vrij deeltje plus een harmonische oscillator in de massacentrumcoördinaat $\vec{R}$, resp. relatieve coördinaat $\vec{x}$, door de transformatie in vergelijking 3.24. De variantie op de grootte van de relatieve coördinaat,

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle_{S_0} - \langle x \rangle_{S_0}^2, \quad (4.5)$$

geeft dan een beeld over welke afstand de lokalisatie van het polaron gebeurt. We definiëren de polaron *straal* als vierkantswortel hiervan in vergelijking 4.14. Coördinaat $\vec{x}$ beschrijft een symmetrisch systeem in de vorm van een harmonische oscillator waardoor we de verwachtingswaarde op de positie in vergelijking 4.5 kunnen verwaarlozen. Daarnaast verwachten we de nulpuntstrilling terug te vinden uit σ_x^2 - een kwantum-onzeker effect doordat we de verwachtingswaarden berekenen in de ultra-koude limiet.

Formule 3.10 geeft het recept voor de verwachtingswaarde van operator x^2 volgens het padintegraal formalisme. Naast de relatieve coördinaat, wordt de padintegraal genomen over alle mogelijke paden in het massacentrum coördinaat

$$\langle x^2 \rangle_{S_0} = \frac{1}{Z_0} \int d\vec{x} \int d\vec{R} \int_{\{\vec{x}, 0\}}^{\{\vec{x}, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' \int_{\{\vec{R}, 0\}}^{\{\vec{R}, \hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{R}' (x')^2 \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_0 [\vec{x}'(\tau), \vec{R}'(\tau)] \right). \quad (4.6)$$

We nemen de verwachtingswaarde over de model actie S_0 uit vergelijking 3.27, berekend uit de Langrangiaan van het modelsysteem $\mathcal{L}_0$ in vergelijking 3.26. Net zoals $\mathcal{L}_0$ en S_0 ontkoppelt in een harmonische oscillator en een vrij deeltje,

ontkoppelt de model toestandssom Z_0 in vergelijking 3.28. We maken gebruik van deze ont koppeling zodat de padintegratie wegvalt over de massacentrum coördinaten in de berekening van de variantie

$$\langle x^2 \rangle_{S_0} = \frac{1}{Z_{H.O.}} \int d\vec{x} \int_{\{\vec{x},0\}}^{\{\vec{x},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' (x')^2 \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_{H.O.} [\vec{x}'(\tau)] \right). \quad (4.7)$$

Hierbij is de propagator van het harmonisch oscillator-deel af te lezen uit vergelijking 3.8. Vergelijking 3.7 linkt de tijds-imaginaire propagator aan de thermische dichtheidsmatrix

$$\rho_{H.O.}(\vec{x}|\vec{x}) = \int_{\{\vec{x},0\}}^{\{\vec{x},\hbar\beta\}} \mathcal{D}\vec{x}' \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{\tau=0}^{\hbar\beta} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}'^2 + \frac{K}{2} x'^2 \right) d\tau \right\}. \quad (4.8)$$

Deze werd al uitgerekend in vergelijking 3.33 in de context van de grondtoestandsenergie. We herhalen dat

$$\rho_{H.O.}(\vec{x}|\vec{x}) = C e^{-ax^2} \quad \text{met} \quad C = \frac{\mu\Omega}{2\pi\hbar \sinh(\hbar\beta\Omega)} \quad \text{en} \quad c = \frac{\mu\Omega}{\hbar} \tanh\left(\frac{\hbar\beta\Omega}{2}\right). \quad (4.9)$$

We kunnen de verwachtingswaarde van x^2 ook uitrekenen via de diagonaalelementen van de thermische dichtheidsmatrix, genormeerd met de toestandssom

$$\langle \vec{x}^2 \rangle_{S_0} = \frac{\int_A \vec{x}^2 \rho_{H.O.}(\vec{x}|\vec{x}) d^2\vec{x}}{\int_A \rho_{H.O.}(\vec{x}|\vec{x}) d^2\vec{x}}, \quad (4.10)$$

zoals in vergelijking 3.5. Door de vorm van de thermische dichtheidsmatrix in vergelijking 4.9, bevat de verwachtingswaarde een Gaussische integraal. We berekenen de verwachtingswaarde voor een tweedimensionaal systeem:

$$\langle (x^2 + y^2) \rangle_{S_0} = \frac{\int_A (x^2 + y^2) e^{-c(x^2+y^2)} dx dy}{\int_A e^{-c(x^2+y^2)} dx dy} = \frac{-\frac{d}{da} \left(\frac{\pi}{a} \right)}{\frac{\pi}{c}} = \frac{1}{c}. \quad (4.11)$$

We brengen dit naar de ultra-koude limiet, gegeven door

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle (\vec{x}^2) \rangle_{S_0} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\hbar}{\mu\Omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\right)} = \frac{\hbar}{\mu\Omega}. \quad (4.12)$$

We zetten dit om in termen van dimensieloze variationele parameters $\tilde{\Omega}$ en $\tilde{M}$, analoog aan hoe we de uitdrukking voor de grondtoestandsenergie hebben afgeleid. We splitsen nog ξ^2 af van x^2 zodat het resultaat

$$\langle \vec{x}^2 \rangle_{S_0} = \frac{1}{\tilde{\Omega}} \left(\frac{1 + \tilde{M}}{\tilde{M}} \right), \quad (4.13)$$

ook dimensieloos wordt. De grootte van het polaron of polaron *straal* r_{pol} wordt gedefinieerd als vierkantswortel hiervan,

$$\tilde{r}_{pol}(\tilde{\Omega}, \tilde{M}) = \sqrt{\langle \vec{x}^2 \rangle_{S_0}} = \sqrt{\frac{1 + \tilde{M}}{\tilde{\Omega} \tilde{M}}}, \quad (4.14)$$

en is een maat voor de lokalisatie-lengte van de impureiteit. Het resultaat voor de polaron straal vergelijken met het driedimensionale geval in [19] geeft een hint naar een schalingsrelatie

$$\frac{2}{3} r_{pol}^{3D} = r_{pol}^{2D}. \quad (4.15)$$

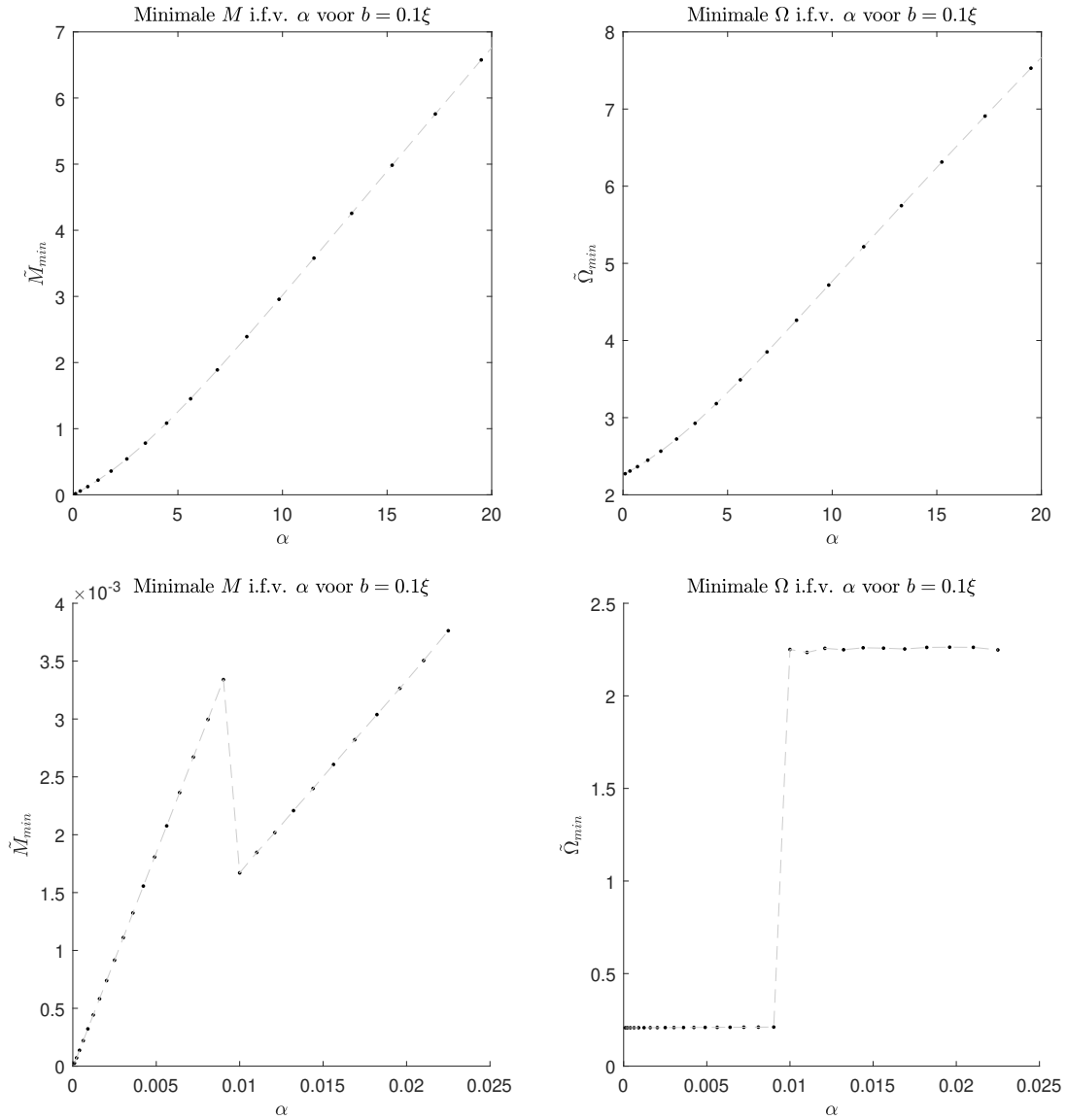
Figuur 4.10 geeft de dimensieloze polaron straal uit vergelijking 4.14, in functie van koppelingssterkte α , voor een $^{87}\text{Rb}^+ - ^{87}\text{Rb}$ systeem. Hier worden variationele parameters $\tilde{M}_{min}$ en $\tilde{\Omega}_{min}$ gebruikt die voor elke α de energie minimaliseren. Hierbij wordt de karakteristieke lengte

$$R = \xi \sqrt{a} \quad (4.16)$$

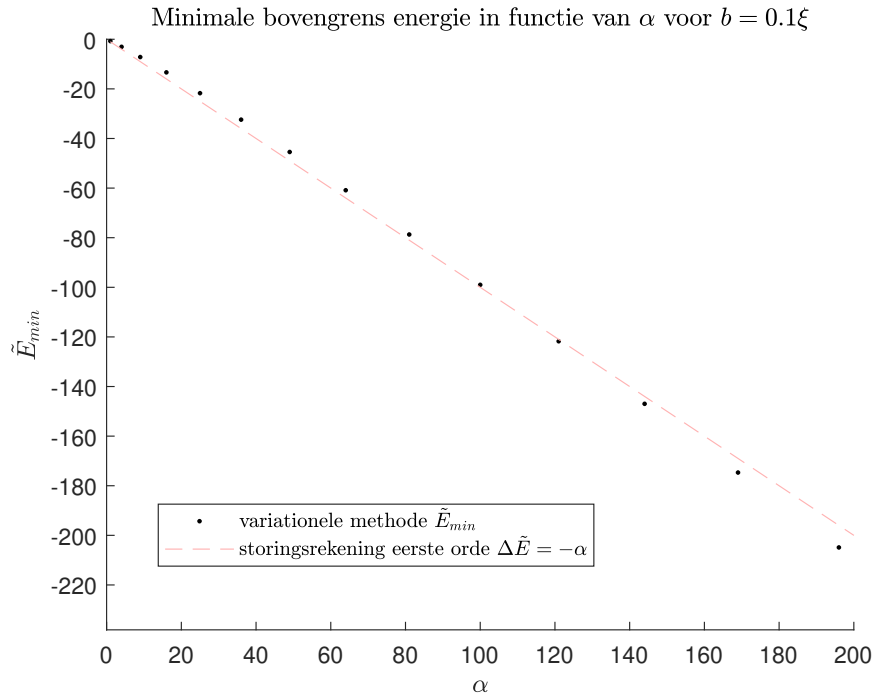
uit vergelijking 3.73 afgebeeld. We zien dat voor een waarde $\alpha \approx 15$ de polaron opsluiting ten gevolge van de koppeling met de bosonen, groter wordt dan de polaron straal. We moeten hierbij wel rekening houden dat de opsluitingsgrootte van de externe harmonische potentiaal niet kleiner is dan de polaron straal, wat de transitie van koppelingsregime kan maskeren [45]. Voor een gegeven opsluitingsfrequentie ω_i , is de karakteristieke lengteschaal van de harmonische opsluiting

$$R_i = \sqrt{\frac{\hbar}{m_{pol} \omega_i}} = \xi \sqrt{\frac{1}{\tilde{m}_{pol} \tilde{\omega}_i}}. \quad (4.17)$$

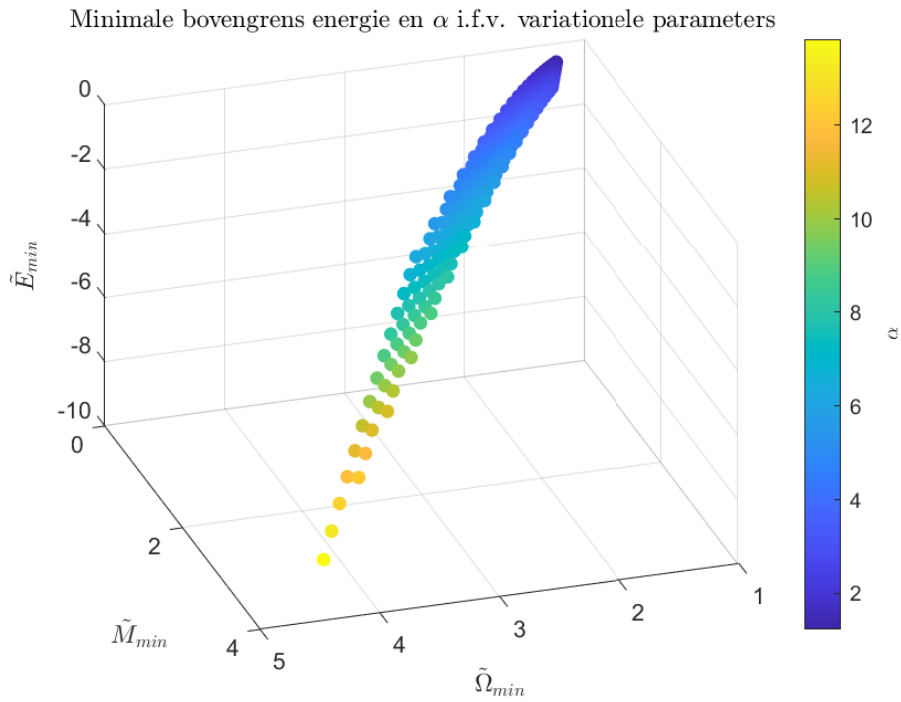
In Figuur 4.10 is dan ook R_x afgebeeld met opsluitingsfrequentie $\omega_x/(2\pi) = 11\text{Hz}$ uit [4].



Figuur 4.1: Dimensieloze variationele parameters $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$ die de bovengrens minimaliseren voor de grondtoestandsenergie in vergelijking 3.89, in functie van polaronische koppelingssterkte α met close-up voor kleine α .

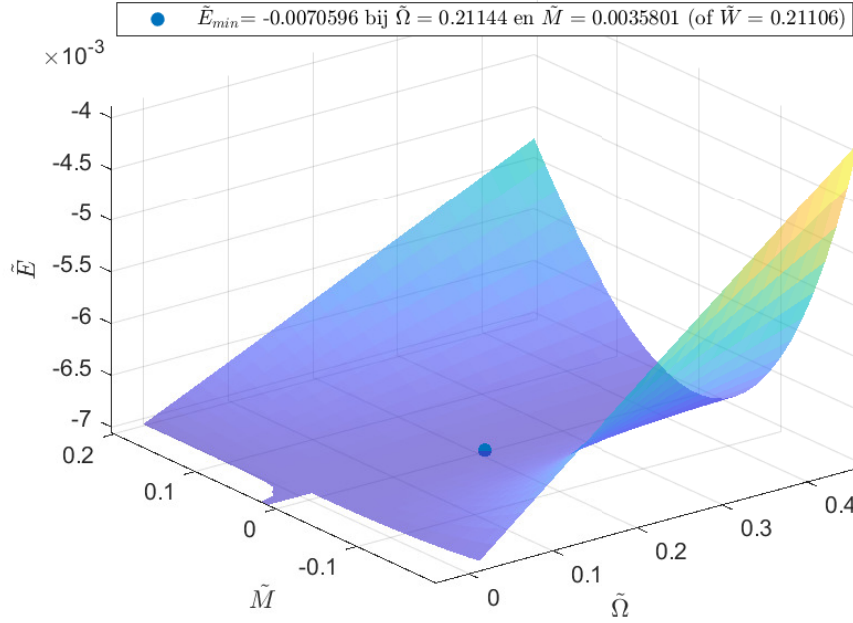


Figuur 4.2: Geminimaliseerde bovengrens van grondtoestandsenergie $\tilde{E}_{min}$ uit vergelijking 3.89 in functie van polaronische koppingssterkte α , samen met de oplossing via storingsrekening in eerste orde van α .

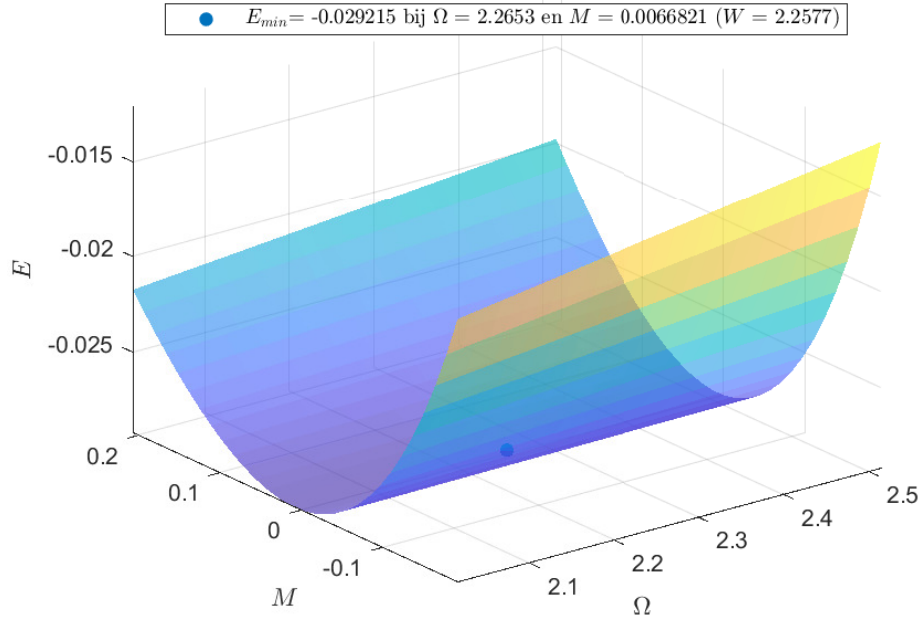


Figuur 4.3: Oplossingsgebied van de geminimaliseerde bovengrens van de grondtoestandsenergie $\tilde{E}_{min}$ in functie van de minimaliserende variationale parameters $\tilde{M}_{min}$ en $\tilde{Q}_{min}$ voor verschillende waarden van α .

bovengrens energie i.f.v. $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$ voor $\tilde{a}/\tilde{b}=0.049167$, $\tilde{b}=0.1$ en $\alpha=0.0096694$

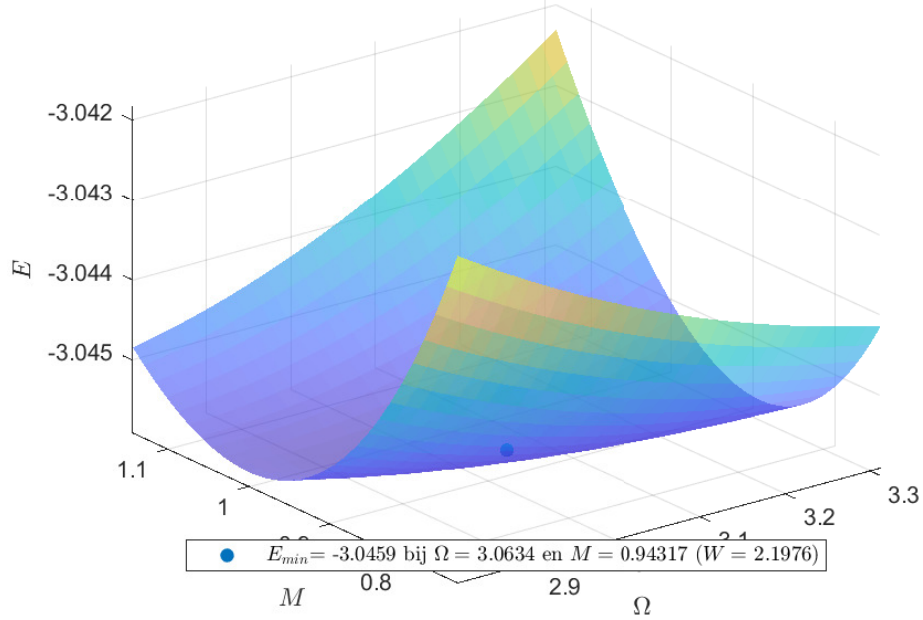


Bovengrens energie in functie van M en Ω voor $a/b=0.1$, $b=0.1$ en $\alpha=0.04$

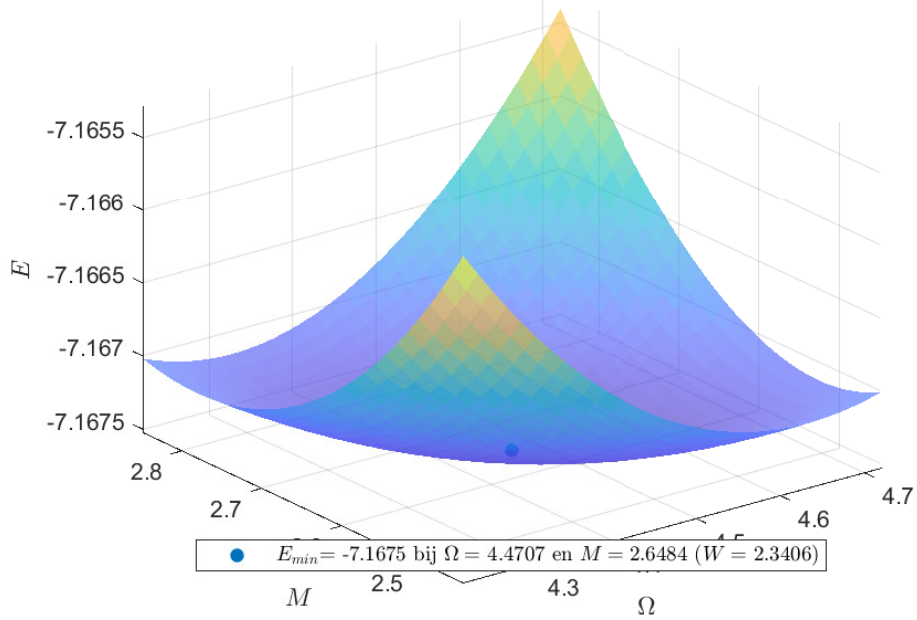


Figuur 4.4: Bovengrens van grondtoestandsenergie $\tilde{E}$ uit vergelijking 3.89 in functie van dimensioneloze variationele parameters $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$. De geminimaliseerde energie $\tilde{E}_{min}$ voor $\alpha \approx 0.01, 0.04, 4, 9$ is aangeduid met een bolletje. (1/2)

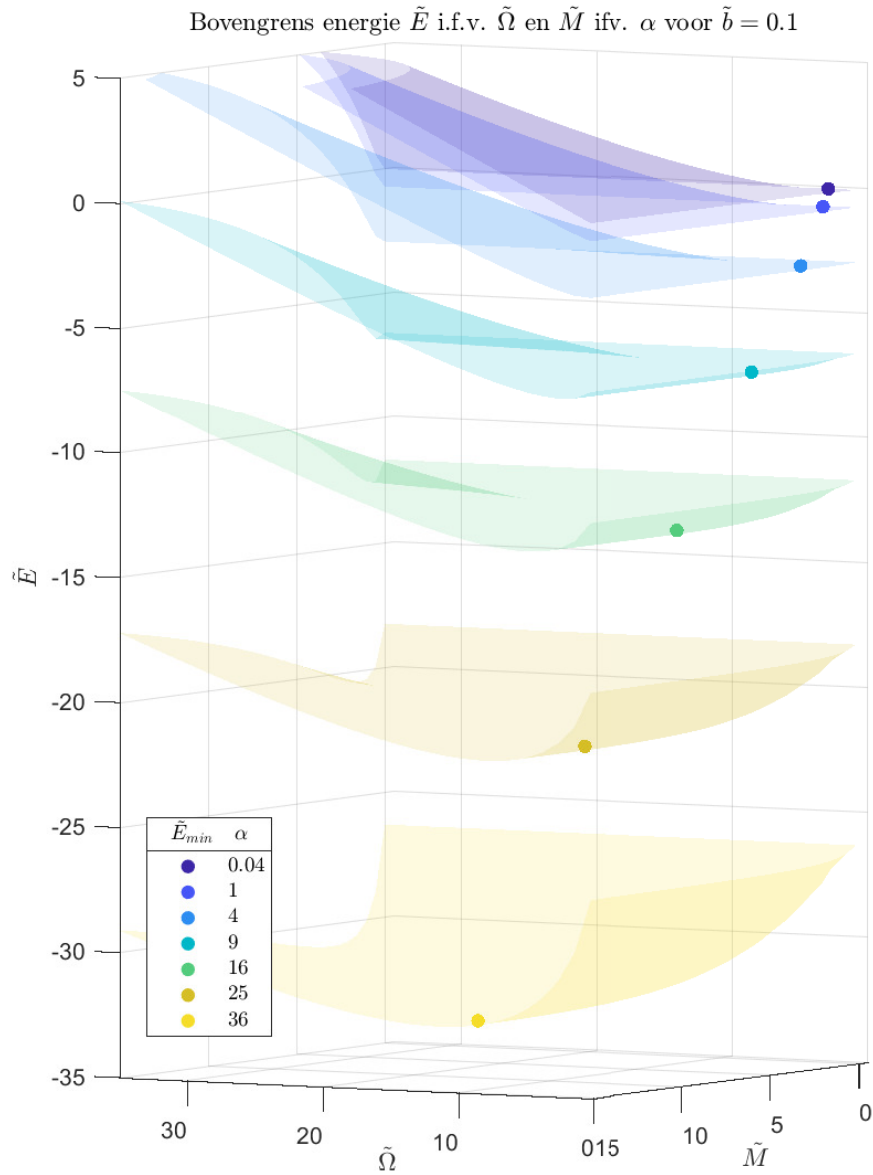
Bovengrens energie in functie van M en Ω voor $a/b=1$, $b=0.1$ en $\alpha=4$



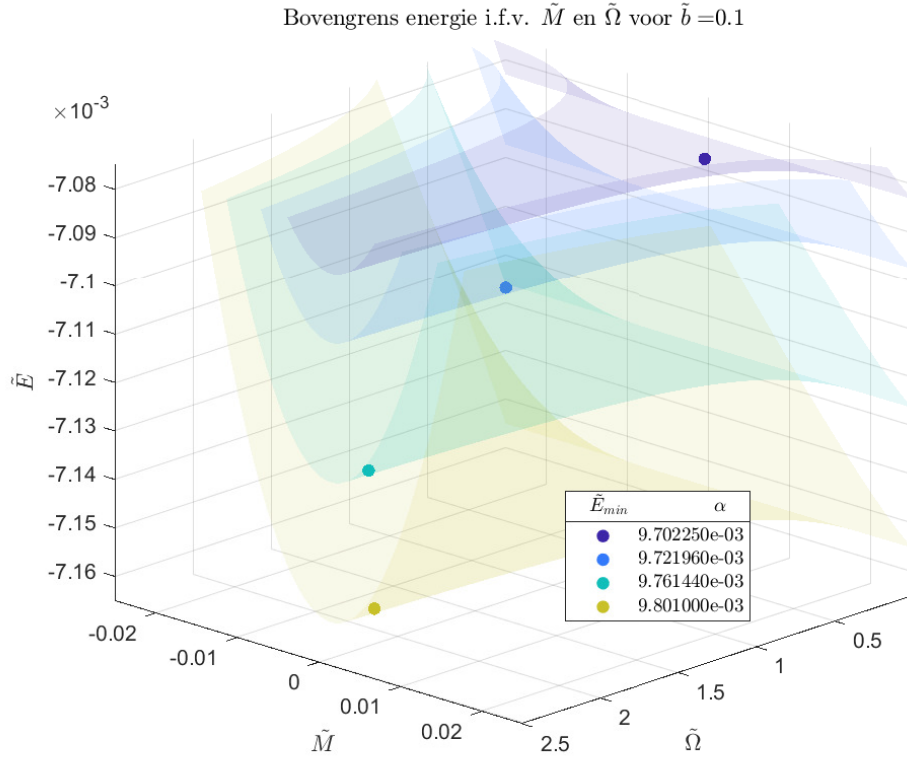
Bovengrens energie in functie van M en Ω voor $a/b=1.5$, $b=0.1$ en $\alpha=9$



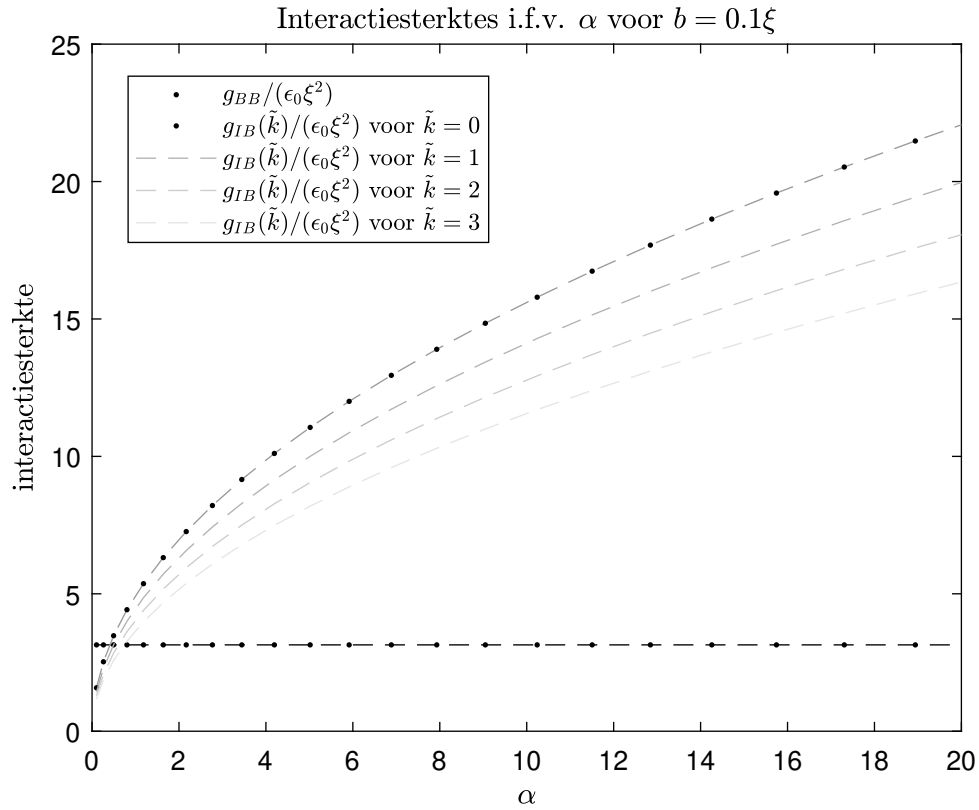
Figuur 4.5: Bovengrens van grondtoestandsenergie $\tilde{E}$ uit vergelijking 3.89 in functie van dimensionele variatiele parameters $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$. De geminimaliseerde energie $\tilde{E}_{min}$ voor $\alpha \approx 0.01, 0.04, 4, 9$ is aangeduid met een bolletje. (2/2)



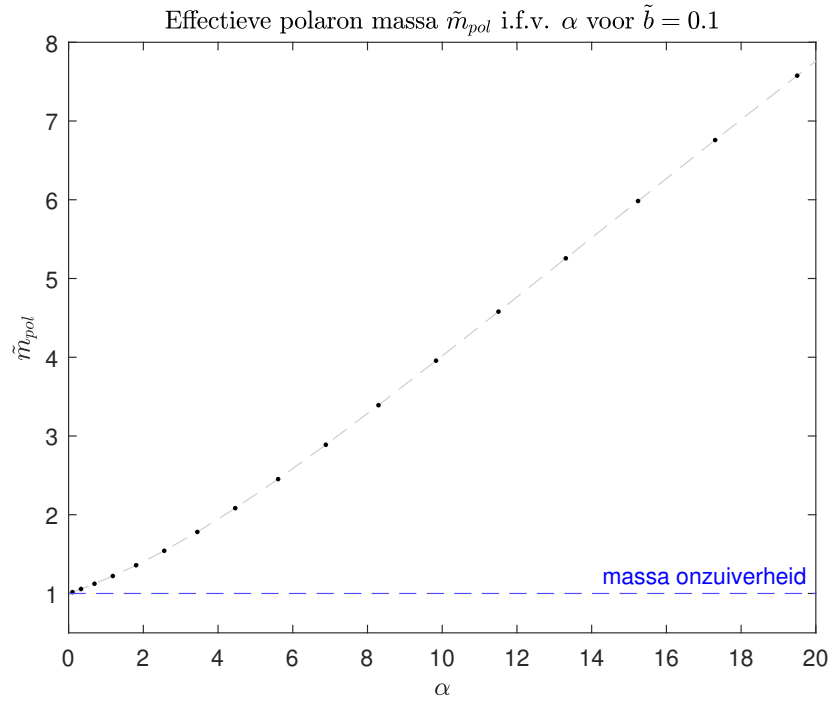
Figuur 4.6: Bovengrens van grondtoestandsenergie $\tilde{E}$ in functie van dimensionele variationale parameters $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$. De geminimaliseerde energie is aangeduid met een bolletje voor waarden van α uit Tabel 4.1.



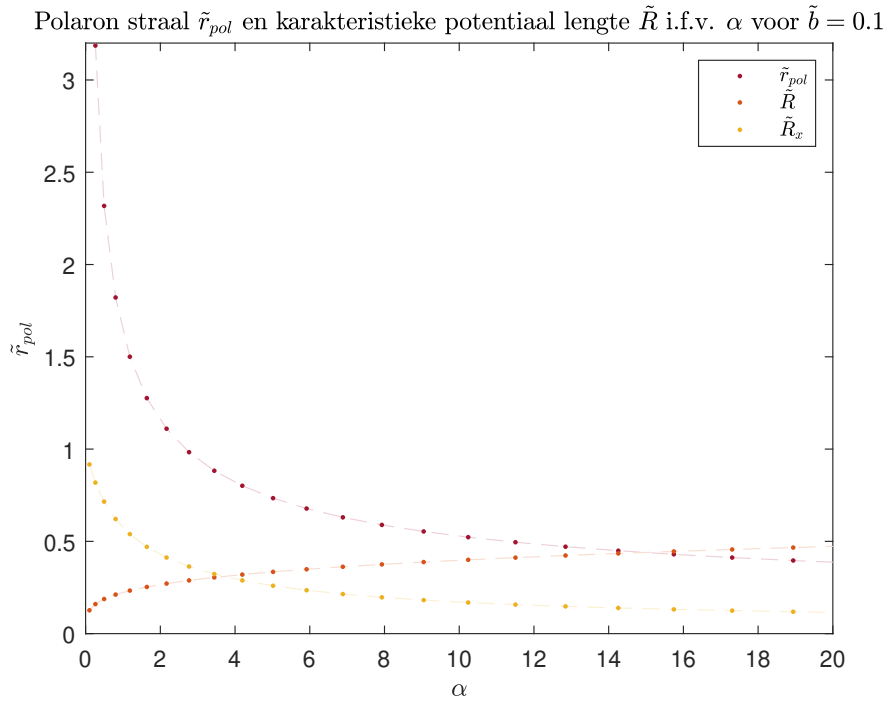
Figuur 4.7: Verloop van bovengrens van grondtoestandsenergie $\tilde{E}$ in functie van dimensioneloze variationele parameters $\tilde{M}$ en $\tilde{\Omega}$ rond regio $\alpha = 0.1$ met waarden in Tabel 4.2.



Figuur 4.8: Dimensieloze boson-boson en impureit-boson interactie amplitude uit vergelijking 4.2 voor verschillende waarden van $\tilde{k}$ in functie van polaronische koppelingsconstante α .



Figuur 4.9: Dimensieloze effectieve polaron massa $\tilde{m}_{pol}$ uit vergelijking 4.4, in functie van koppelingssterkte α , samen met de onge-koppelde polaron massa.



Figuur 4.10: Dimensieloze polaron straal $\tilde{r}_{pol}$ uit vergelijking 4.14 en karakteristieke lengte $\tilde{R}$ uit vergelijking 4.16, in functie van koppelingssterkte α .

5 Besluit

In deze thesis bepaalden we de energie, straal en massa in de ultra-koude limiet van een geladen Bose polaron in twee dimensies door middel van de variationele Feynman padintegraal methode. Hiervoor gebruikten een systeem dat bestaat uit een Rubidium ion $^{87}\text{Rb}^+$ dat koppelt met een quasi-tweedimensionaal condensaat van interagerende Rubidium ^{87}Rb atomen.

We introduceerden eerst het Fröhlich polaron dat historisch als blauwdruk gebruikt werd om polaron effecten te beschrijven. We bekeken welke eigenschappen onze experimentele opstelling moest vertonen om een tweedimensionaal Bose-Einstein condensaat waar te maken. We besluiten dat de opsluitingspotential best een harmonische val beschrijft, waarbij één bewegingsrichting wordt beperkt. Een stabiel condensaat vereiste dan toevoeging van interacties waardoor we beschrijving in termen van een ideaal Bose gas moesten opgeven. Door de driedimensionale aard van de interacties werd het condensaat als quasi-tweedimensionaal beschouwd. De polaron effecten kwamen pas tot stand na toevoeging van een geladen onzuiverheid aan het condensaat. Door de onzuiverheid een lading toe te kennen kon de interactiepotential niet meer als contactpotential beschouwd worden wat bij een neutraal Bose polaron wel het geval was. De lange-afstands effecten van de interactiepotential werden samen met de interacties van het condensaat meegenomen in een polaronische koppelingsconstante.

Door de Bogoliubov transformatie toe te passen, hebben we de focus verlegd naar een ideaal gas van Bogoliubov excitaties, in interactie met de onzuiverheid. Als gevolg, konden we de variationele Feynman padintegraal methode gebruiken, wat in de ultra-koude limiet een bovengrens gaf voor de grondtoestandsenergie. Dit resultaat kon nog geminimaliseerd worden in functie van de variationele parameters. Een koppel minimaliserende parameters legde een kleinste bovengrens vast voor de grondtoestandsenergie waarvoor de overeenkomstige polaron massa en straal werd berekend.

Het gedrag van de resultaten veranderde door de koppelingssterkte aan te passen. Analoog aan het driedimensionaal geval, hebben we ondervonden dat de toename van de effectieve polaron massa en de daling van de polaron straal karaktereigenschappen zijn van sterke koppeling. Hierbij daalt ook de polaronische energie, hetgeen duidt op een gebonden toestand van de onzuiverheid met het condensaat.

In toekomstig onderzoek kunnen we de Beyond-Fröhlich termen meenemen in de beschrijving. Op deze manier wordt het lange afstandskarakter van het polaron beter in rekening gebracht. Daarnaast kunnen we het gebruik van de ultra-koude limiet vermijden zodat effecten van temperatuur zichtbaar worden. Verder kunnen we het geval bekijken waarbij meerdere ionische onzuiverheden worden toegevoegd aan het condensaat.

Bibliografie

- [1] Prof. dr. Jacques Tempere. (2021-2022). Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity (Chapter 1). Universiteit Antwerpen.
- [2] Pethick, C. J., & Smith, H. (2008). Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511802850>
- [3] Mermin, N. D., & Wagner, H. (1966). Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. In Physical Review Letters (Vol. 17, Issue 22, pp. 1133-1136). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.17.1133>
- [4] Hadzibabic, Z., Krüger, P., Cheneau, M., Battelier, B., & Dalibard, J. (2006). The Atomic Bose Gas in Flatland. In AIP Conference Proceedings. ATOMIC PHYSICS 20: XX International Conference on Atomic Physics - ICAP 2006. AIP. <https://doi.org/10.1063/1.2400645>
- [5] Hadzibabic, Z., Krüger, P., Cheneau, M., Battelier, B., & Dalibard, J. (2006). Berezinskii-Kosterlitz-Thouless crossover in a trapped atomic gas. In Nature (Vol. 441, Issue 7097, pp. 1118-1121). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1038/nature04851>
- [6] Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E., & Cornell, E. A. (1995). Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. In Science (Vol. 269, Issue 5221, pp. 198-201). American Association for the Advancement of Science (AAAS). <https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198>
- [7] ICTP Condensed Matter and Statistical Physics. (2018, September 6). Berezinskii-Kosterlitz-Thouless physics and Bose Einstein Condensates I [Video]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=1YZfuoXtRhk>
- [8] Penrose, O., & Onsager, L. (1956). Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. In Physical Review (Vol. 104, Issue 3, pp. 576-584). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrev.104.576>
- [9] Fröhlich, H. (1954). Electrons in lattice fields. In Advances in Physics (Vol. 3, Issue 11, pp. 325-361). Informa UK Limited. <https://doi.org/10.1080/00018735400101213>
- [10] Pekar, S. (1946). Local quantum states of electrons in an ideal ion crystal. Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki, 16(4), 341-348. (niet gedigitaliseerd).
- [11] Lee, T. D., Low, F. E., & Pines, D. (1953). The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal. In Physical Review (Vol. 90, Issue 2, pp. 297-302). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrev.90.297>
- [12] Feynman, R. P. (1955). Slow Electrons in a Polar Crystal. In Physical Review (Vol. 97, Issue 3, pp. 660-665). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrev.97.660>
- [13] Tomza, M., Jachymski, K., Gerritsma, R., Negretti, A., Calarco, T., Idziaszek, Z., & Julienne, P. S. (2019). Cold hybrid ion-atom systems. In Reviews of Modern Physics (Vol. 91, Issue 3). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/revmodphys.91.035001>
- [14] Krych, M., Idziaszek, Z. (2015). Description of ion motion in a Paul trap immersed in a cold atomic gas. In Physical Review A (Vol. 91, Issue 2). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physreva.91.023430>
- [15] Jorgensen, N. B., Wacker, L., Skalmstang, K. T., Parish, M. M., Levinsen, J., Christensen, R. S., Bruun, G. M., & Arlt, J. J. (2016). Observation of Attractive and Repulsive Polarons in a Bose-Einstein Condensate. In Physical Review Letters (Vol. 117, Issue 5). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.117.055302>
- [16] Chin, C., Grimm, R., Julienne, P., & Tiesinga, E. (2008). Feshbach Resonances in Ultracold Gases. arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.0812.1496>
- [17] Hu, M.-G., Van de Graaff, M. J., Kedar, D., Corson, J. P., Cornell, E. A., & Jin, D. S. (2016). Bose polarons in the strongly interacting regime. arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1605.00729>

- [18] Skou, M. G., Skov, T. G., Jorgensen, N. B., Nielsen, K. K., Camacho-Guardian, A., Pohl, T., Bruun, G. M., & Arlt, J. J. (2021). Non-equilibrium quantum dynamics and formation of the Bose polaron. In *Nature Physics* (Vol. 17, Issue 6, pp. 731-735). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1038/s41567-021-01184-5>
- [19] Tempere, J., Casteels, W., Oberthaler, M. K., Timmermans, E., & Devreese, J. T. (2009). Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.0906.4455>
- [20] Cucchietti, F. M., & Timmermans, E. (2006). Strong-Coupling Polarons in Dilute Gas Bose-Einstein Condensates. In *Physical Review Letters* (Vol. 96, Issue 21). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.210401>
- [21] N.N. Bogoliubov. (1947). *Journal of Physics. Academy of Sciences of the Ukrainian SSR and Moscow State University (USSR)*. 11, 23 (1947).
- [22] Pitaevskii, L. P., & Stringari, S. (2003). *Bose-Einstein Condensation*. Oxford, England: Clarendon Press. ISBN0198507194.
- [23] Peeters, F. M., & Devreese, J. T. (1985). Acoustical polaron in three dimensions: The ground-state energy and the self-trapping transition. In *Physical Review B* (Vol. 32, Issue 6, pp. 3515-3521). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevb.32.3515>
- [24] Semiconductors, E.I., & Devreese, J.T. (1972). *Polarons in ionic crystals and polar semiconductors: Antwerp Advanced Study Institute 1971 on Fröhlich polarons and electron-phonon interaction in polar semiconductors*.
- [25] Jackson, S. A., & Platzman, P. M. (1981). Polaronic aspects of two-dimensional electrons on films of liquid He. In *Physical Review B* (Vol. 24, Issue 1, pp. 499-502). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevb.24.499>
- [26] Bei-Bing, H., & Shao-Long, W. (2009). Polaron in Bose-Einstein-Condensation System. In *Chinese Physics Letters* (Vol. 26, Issue 8, p. 080302). IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/0256-307x/26/8/080302>
- [27] Ardila, L. A. P., & Giorgini, S. (2015). Impurity in a Bose-Einstein condensate: study of the attractive and repulsive branch using quantum Monte-Carlo methods. *arXiv*. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1507.07427>
- [28] Prokof'ev, N. V., & Svistunov, B. V. (1998). Polaron Problem by Diagrammatic Quantum Monte Carlo. In *Physical Review Letters* (Vol. 81, Issue 12, pp. 2514-2517). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.81.2514>
- [29] Prof. dr. Jacques Tempere. (2021-2022). Course notes for Solid State Physics II. (Chapter 1). Universiteit Antwerpen.
- [30] Prof. dr. Jacques Tempere. (2021-2022). Course notes for Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity. Universiteit Antwerpen.
- [31] Two-dimensional Bose fluids: An atomic physics perspective. (2011). [JB]. *La Rivista Del Nuovo Cimento*, 34(6), 389-434. <https://doi.org/10.1393/ncr/i2011-10066-3>
- [32] Adhikari, S. K. (1986). Quantum scattering in two dimensions. In *American Journal of Physics* (Vol. 54, Issue 4, pp. 362-367). American Association of Physics Teachers (AAPT). <https://doi.org/10.1119/1.14623>
- [33] Cold Chemistry. (2017). In O. Dulieu & A. Osterwalder (Red.), *Theoretical and Computational Chemistry Series*. Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/9781782626800>
- [34] Peeters, F. M., & Devreese, J. T. (1985). Acoustical polaron in three dimensions: The ground-state energy and the self-trapping transition. In *Physical Review B* (Vol. 32, Issue 6, pp. 3515-3521). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevb.32.3515>
- [35] Timour Ichmoukhamedov, Prof. dr. Jacques Tempere. (2022) Padintegraalbeschrijving van systemen met algemeen geheugen: een toepassing op het Bose-polaron probleem. Universiteit Antwerpen.
- [36] Prof. dr. Jacques Tempere. *Inleiding tot Padintegralen in de Kwantummechanica*. Universiteit Antwerpen.
- [37] Wim Casteels, Prof. dr. Jacques Tempere. (2008-2009). *Grondtoestandseigenschappen van een polaron in een Bose-Einstein condensaat*. Universiteit Antwerpen.
- [38] Feynman, R. P. (1955). Slow Electrons in a Polar Crystal. In *Physical Review* (Vol. 97, Issue 3, pp. 660-665). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrev.97.660>
- [39] R. P. Feynman, A. R. Hibbs. (1965). *Quantum Mechanics and Path Integrals*. Dover Publications Inc.; Emended Edition ed edition (21 July 2010).

- [40] J. T. Devreese, 'Fröhlich Polarons from 0D to 3D: Concepts and Recent Developments', arXiv, 2007, doi: 10.48550/ARXIV.0709.4140.
- [41] J. T. Devreese en F. M. Peeters, Red., The Physics of the Two-Dimensional Electron Gas. Springer US, 1987. doi: 10.1007/978-1-4613-1907-8.
- [42] F. M. Peeters, W. Xiaoguang, en J. T. Devreese, 'Ground-state energy of a polaron inndimensions', Physical Review B, vol. 33, nr. 6. American Physical Society (APS), pp. 3926-3934, mrt. 15, 1986. doi: 10.1103/physrevb.33.3926.
- [43] Casteels, W. 'Ultracold gases as a quantum simulator for the polaron.' (2013).
- [44] Casteels, W., Tempere, J., & Devreese, J. T. (2012). Polaronic properties of an impurity in a Bose-Einstein condensate in reduced dimensions. In Physical Review A (Vol. 86, Issue 4). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physreva.86.043614>
- [45] Casteels, W., Tempere, J., & Devreese, J. T. (2010). Polaronic Properties of an Ion in a Bose-Einstein Condensate in the Strong-Coupling Limit. In Journal of Low Temperature Physics (Vol. 162, Issues 3-4, pp. 266-273). Springer Science and Business Media LLC. <https://doi.org/10.1007/s10909-010-0286-0>
- [46] L. H. A. Simons, J. Tempere, M. Wouters, 'On the properties of charged Bose polarons.' (2024). Theory of Quantum and Complex systems. Universiteit Antwerpen.
- [47] Mishchenko, A. S., & Nagaosa, N. (2004). Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the $t - J$ Model: From the Weak to the Strong Coupling Regime. In Physical Review Letters (Vol. 93, Issue 3). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.93.036402>
- [48] Devreese, J. T., & Alexandrov, A. S. (2009). Fröhlich polaron and bipolaron: recent developments. In Reports on Progress in Physics (Vol. 72, Issue 6, p. 066501). IOP Publishing. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/72/6/066501>
- [49] R. P. Feynman, Statistical Mechanics: A Set of Lectures (Addison-Wesley, Boston, 1990)
- [50] Mishchenko, A. S., Nagaosa, N., Prokof'ev, N. V., Sakamoto, A., & Svistunov, B. V. (2003). Optical Conductivity of the Fröhlich Polaron. In Physical Review Letters (Vol. 91, Issue 23). American Physical Society (APS). <https://doi.org/10.1103/physrevlett.91.236401>