

FACULTEIT WETENSCHAPPEN  
DEPARTEMENT FYSICA  
ACADEMIEJAAR 2019-2020



---

Dynamica van een onzuiverheid in een  
Bose-Einstein condensaat ver uit  
evenwicht

---

ROBBE CEULEMANS

*Promotor:*

PROF. DR. JACQUES TEMPERE

Proefschrift ter verkrijging van de graad van  
MASTER IN DE FYSICA

# Abstract

Since the early days of quantum mechanics, the dynamics of many-body systems far from equilibrium has been a matter of debate. In recent years there has been significant progress in this domain, to a great extent due to the successes of experiments in ultracold atomic gases. A remarkable property of some many-body systems is the emergence of equilibrium statistical mechanics through unitary dynamics. This process of thermalization has already been studied theoretically as well as numerically in a number of isolated quantum systems. The relaxation is explained by the, nowadays widely accepted, *eigenstate thermalization hypothesis*. The central assumption here is that the many-body energy eigenstates behave much like statistical ensembles. Recent studies focus on determining if and how thermalization occurs in various systems. It has recently also become the focus of a number of experimental studies.

Motivated by this we study a single mobile impurity immersed in a Bose-Einstein condensate. The reason this specific system is chosen is because recent experiments have finally proven the existence of the Bose polaron, a quasi-particle consisting of such an impurity and a number of self-induced phonons or Bogoliubov excitations. However, not much is known about the formation of this state. Through numerical analysis we intend to get a better picture of the dynamics that leads to the formation of the polaron state and get an idea of the characteristic time scales involved.

In this work the system is driven out of equilibrium by a quench of the repulsive boson-impurity interaction. The dynamics is studied by following the time evolution of the momentum distribution of the occupation of phonon modes. This is done in the frame of reference of the impurity by applying the Lee-Low-Pines transformation on a Fröhlich Hamiltonian that describes the system. Recent studies have shown the dynamics of a similar system using a mean-field approximation. Here we intend to go beyond this assumption of a coherent many-body state and show the effect of including correlations between the phonons.

Relaxation to an equilibrium occupation is observed. The time scale on which this happens is of the same order as the times relevant in the corresponding experiment. The total number of phonons involved in forming the polaron state turns out to be larger when correlations between them are taken into account to some degree. To show the formation in real space, a set of density profiles at different evolution times is constructed.

# Samenvatting

Een centraal probleem in de kwantummechanica vandaag de dag is de dynamica van veeldeeltjessystemen ver uit evenwicht. Eén van de aspecten waar veel onderzoek naar wordt verricht, is de thermalisatie van sommige veeldeeltjessystemen via unitaire tijdsevoluties. Hiermee bedoelt men dat de verwachtingswaarden van macroscopische observabelen relaxeren naar stationaire waarden die equivalent zijn aan de waarden voorspeld via het overeenkomstige thermisch ensemble. De *eigentoestand thermalisatie hypothese* tracht dergelijk gedrag te verklaren door aan te nemen dat energie eigentoestanden van veeldeeltjessystemen zich gedragen als statistische ensembles. Er is echter nog veel onzekerheid over de systemen waarvoor de hypothese opgaat en op welke tijdschalen thermalisatie dan zou plaatsvinden.

Met dit in het achterhoofd bestuderen we in dit werk een enkele onzuiverheid die koppelt aan een Bose-Einstein condensaat. Dit specifieke systeem is gekozen, omdat in recente experimenten het bestaan van het Bose polaron is aangetoond. Dit is een quasi-deeltje dat bestaat uit een onzuiverheid omgeven door een aantal zelf-geïnduceerde fononen of Bogoliubov excitaties. Over de vorming van een dergelijke toestand is echter nog veel onzekerheid. Om een beter beeld te krijgen over hoe zulke toestand ontstaat en de tijdschaal die hiermee gepaard gaat, wordt in dit werk de dynamica numeriek onderzocht. Het systeem vertrekt hierbij vanuit een toestand ver uit evenwicht door het toepassen van een kwantum quench.

De dynamica wordt gevolgd a.d.h.v. de tijdsevolutie van de bezetting van de excitatiemodes. Dit gebeurt in het referentiestelsel van de onzuiverheid door de Lee-Low-Pines transformatie toe te passen op een Fröhlich Hamiltoniaan die het systeem voorstelt. Eerdere studies hebben hetzelfde doel, maar vertrekken steeds vanuit een mean-field benadering van de toestand. In dit werk trachten we een stap verder te gaan door verstrengeling tussen de fononen deels in rekening te brengen. De veeldeeltjestoestand wordt dan niet langer als coherent verondersteld.

Het systeem lijkt in de resultaten inderdaad te relaxeren naar een evenwichtsbezetting van de fononmodes. De tijdschaal waarop dit gebeurt, is van dezelfde grootteorde als de tijden die relevant zijn voor het experiment dat wordt nagebootst. In vergelijking met de mean-field benadering is het totaal aantal fononen betrokken bij de vorming van het polaron nu groter. Om ook de invloed van de onzuiverheid op het condensaat in de reële ruimte weer te geven, wordt een reeks dichtheidsprofielen op verschillende tijdstippen na de quench opgesteld.

# Dankwoord

Aan het begin van deze thesis wil ik even stilstaan bij de enorme impact die enkele personen gehad hebben op mij niet alleen gedurende dit laatste jaar, maar tijdens de vijf mooie jaren van mijn opleiding fysica.

Mijn dank gaat allereerst uit naar professor Jacques Tempere voor het aandragen van het uiterst fascinerende onderwerp waarover de thesis gaat en voor alle intrigerende gesprekken hierrond. Ik heb enorm veel van hem geleerd in het kader van dit werk en tijdens de lessen van de vele vakken die hij doceert in de Bachelor en Master. Zonder zijn hulp en expertise had ik deze thesis allicht niet tot dit resultaat gebracht. Daarnaast wil ik ook Timour Ichmoukhamedov en Lennart Fernandes bedanken. Bij hen kon ik steeds terecht voor tips, goede bronnen of een interessante discussie over uitwerkingen en resultaten.

Dit lijkt me ook een geschikt moment om professor Milorad Milošević te bedanken voor zijn onmisbare coördinatie van mijn Erasmus uitwisseling. De ervaringen en herinneringen die ik rijker ben na een jaar studeren in Zweden, hebben mij als persoon enorm beïnvloed.

Ik ben mijn ouders veel dank verschuldigd. Hun steun in al mijn keuzes en bij de dingen die ik wil ondernemen, is onmisbaar voor mij. In het bijzonder wil ik mijn moeder bedanken voor het creëren van de best mogelijke leeromgeving en voor het proeflezen van dit werk. Ook mijn zussen, grootouders, vrienden en familie mogen in deze lijst niet ontbreken. Het is hun warmte en aanmoediging die steeds weer goede moed geeft.

# Inhoudsopgave

<b>1</b>	<b>Inleiding</b>	<b>5</b>
1.1	Bose-Einstein condensatie . . . . .	5
1.2	Het Polaron concept . . . . .	7
1.3	Unitaire dynamica na kwantum quench . . . . .	9
1.4	Onderzoeksvraag . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Een kwantumbeeld</b>	<b>12</b>
2.1	Gross-Pitaevskii . . . . .	14
2.2	Bogoliubov benadering . . . . .	15
2.3	Driedeeltjesinteracties . . . . .	18
2.4	Het Bose Polaron . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Eigenschappen van het Bose polaron in evenwicht</b>	<b>24</b>
<b>4</b>	<b>Non-equilibrium dynamica</b>	<b>29</b>
4.1	Thermalisatie na kwantum quench . . . . .	29
4.2	Hiërarchie van correlatiefuncties . . . . .	31
4.3	Cumulanten Expansie . . . . .	33
4.3.1	Mean-field benadering . . . . .	34
4.3.2	Gaussische benadering . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Numerieke analyse</b>	<b>39</b>
5.1	<sup>40</sup> K onzuiverheid . . . . .	40
5.2	Dichtheidsprofielen . . . . .	43
<b>6</b>	<b>Discussie</b>	<b>46</b>
6.1	Vergelijking met het experiment . . . . .	46
6.2	Discretisatie en cumulanten expansie . . . . .	47
6.3	Geldigheid van het Fröhlich model . . . . .	48
6.4	Toekomstperspectief . . . . .	51
<b>A</b>	<b>LLP transformatie</b>	<b>53</b>
<b>B</b>	<b>Matlab code</b>	<b>54</b>
B.1	Discretisatie . . . . .	54
B.2	Tijdsevolutie . . . . .	55

# 1 | Inleiding

*The most exciting phrase to hear in science, the one that heralds new discoveries, is not “Eureka” but “that’s funny...”*

– Isaac Asimov

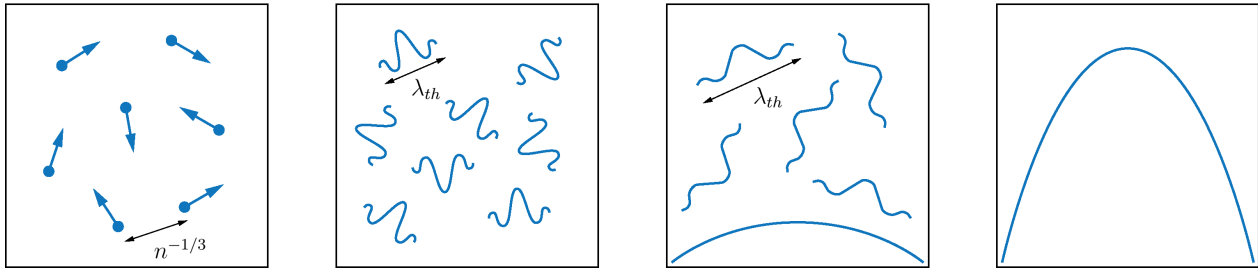
In het eerste hoofdstuk wordt de context van het huidige werk geschetst. Bose-Einstein condensatie wordt eerst kort uitgelegd en voorzien van een historische overzicht. Vervolgens wordt het polaron uit de vaste stof fysica toegelicht, met de nadruk op het Fröhlich polaron. Tot slot overlopen we kort het gebruik van kwantum quenches in het licht van hedendaags onderzoek. Deze drie concepten zijn cruciaal om de onderzoeksvraag van deze thesis te formuleren.

## 1.1 Bose-Einstein condensatie

Klassiek kan men een gas van bosonische atomen beschrijven als een verzameling van harde sferische deeltjes die elastisch met elkaar botsen. Op ieder tijdstip zijn de positie en de impuls van alle deeltjes dan bepaald. De bezetting van de energieniveaus wordt binnen deze voorstelling gegeven door de Maxwell-Boltzmann verdeling. Experimenteel blijkt dit klassieke beeld echter niet altijd op te gaan. De Broglie verklaarde experimentele en theoretische tegenstrijdigheden door de atomen te beschouwen als golfpakketjes met een typische golflengte, de thermische de Broglie golflengte

$$\lambda_{th} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}. \quad (1.1)$$

Het voornaamste verschil met het klassieke beeld is de onzekerheid op de posities van de atomen waarvoor  $\lambda_{th}$  een maat is. Bij hoge temperaturen is de spreiding van de positie klein en gedraagt het gas zich inderdaad klassiek, maar naarmate de temperatuur daalt neemt de de Broglie golflengte toe. Verder afkoelen zal  $\lambda_{th}$  doen groeien tot deze zelfs de orde van de interatomaire afstand bereikt. Voor een homogeen gas in 3D is dit  $n^{-1/3}$  met  $n$  de dichtheid aan atomen. De klassieke beschrijving volstaat niet langer, omdat de golf functies van de verschillende deeltjes beginnen te overlappen. Ook zullen door afkoeling meer en meer deeltjes de laagste energietoestand van het systeem bezetten. In tegenstelling tot fermionen is de bezetting van toestanden bij bosonen namelijk niet gelimiteerd door het Pauliprincipe. Overlapping van deeltjes in dezelfde toestand leidt op zijn beurt tot fasecoherentie van de

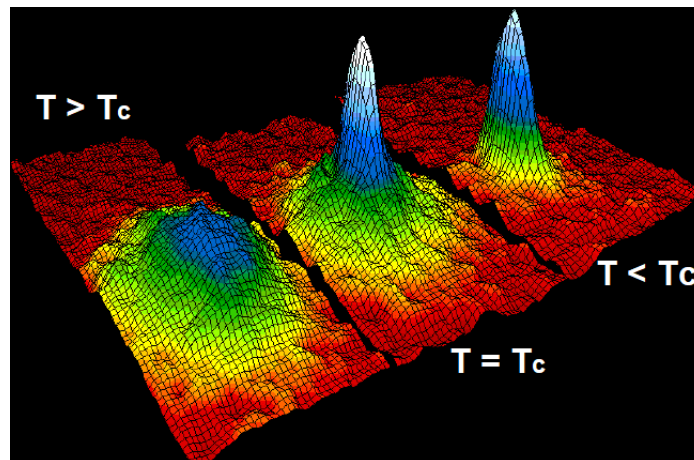


Figuur 1.1: Schematische voorstelling van het proces van Bose-Einstein condensatie. Voor hoge temperaturen  $T \gg T_c$  is de kinetische gastheorie met de Maxwell-Boltzmann verdeling een goede benadering. Naarmate het gas afkoelt, wordt het golfkarakter belangrijker en vanaf  $T = T_c$  is de laagste energietoestand macroscopisch bezet.

golf functies. Hiermee bevindt het systeem zich in een nieuwe fasetoestand, genaamd het *Bose-Einstein Condensaat* (BEC). De verschillende bosonen zijn niet langer onderscheidbaar in de gecondenseerde toestand, maar vertonen collectief hetzelfde gedrag. Het geheel gedraagt zich volgens de eendeeltjetoestand die door een macroscopisch aantal bosonen wordt bezet. Figuur 1.1 toont grafisch het proces van condensatie. Een ideaal Bose gas zou in principe bij het absolute nulpunt volledig gecondenseerd zijn, maar interacties tussen de deeltjes zullen in realiteit zorgen voor een fractie aan niet gecondenseerde bosonen. Een temperatuur  $T > 0$  introduceert dan weer thermische fluctuaties in het systeem die het condensaat nog verder ledigen. Een BEC wordt dus praktisch altijd omgeven door een thermische wolk van geëxciteerde bosonen die met het condensaat interageren, maar ook onderling. De kritische temperatuur  $T_c$  geeft het punt aan waarop genoeg deeltjes de laagste energietoestand bezetten en waarop men dus kan spreken van een BEC. Op dit punt geldt voor een homogeen gas in 3D dat  $\lambda_{th} \sim n^{-1/3}$ . Om een BEC te vormen in een atomair gas moet men vertrekken van zeer ijle systemen. De gasvormige toestand wordt bij afkoeling immers metastabiel t.o.v. de vaste vorm. Opdat het systeem gasvormig blijft tot de faseovergang naar een BEC, mag de dichtheid daarom niet te hoog zijn. Typische dichtheden in een condensaat zijn van de orde  $n \sim 10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Uit (1.1) kan men afleiden dat de kritische temperatuur dan van de orde  $10^{-5} \text{ K}$  moet zijn. Ter vergelijking, de dichtheid aan moleculen van lucht bij kamertemperatuur ligt rond  $10^{22} \text{ cm}^{-3}$  [1].

Einstein was de eerste om in 1924 het idee van deze nieuwe fasetoestand te opperen [2]. Hij baseerde zich hiervoor op het werk van Satyendra Bose rond diens nieuwe boson statistiek [3]. Toch was het wachten tot 1995 op de eerste experimentele realisatie van een BEC in een atomair gas. Toen pas kon men temperaturen op nanokelvinschaal bereiken. Eric Cornell en Carl Wieman slaagden er als eersten in om een gas van  $^{87}\text{Rb}$ -atomen te condenseren door het af te koelen tot maar liefst 170 nanokelvin [4]. Figuur 1.2 toont a.d.h.v. de snelheidsverdeling de faseovergang die ze waarnamen. De twee ontvingen voor hun experiment in 2001 de Nobelprijs in de Fysica. Al snel volgden anderen met condensaten van  $^7\text{Li}$ - [5] en  $^{23}\text{Na}$ -atomen [6]. Voor deze laatste ontving ook Wolfgang Ketterle een deel van de Nobelprijs in 2001. Sindsdien is men erin geslaagd condensaten te creëren van een hele reeks

atomaire gassen<sup>1</sup>, maar ook van moleculen, fotonen en zelfs quasi-deeltjes. Het Pauliprincipe weerhoudt fermionen van condensatie, maar fermion-paren blijken dan weer wel te kunnen condenseren. Dit leidt in verschillende materialen tot supergeleiding.



Figuur 1.2: Snelheidsdistributie van een gas van  $^{87}\text{Rb}$ -atomen bij afkoeling. Hoewel de atomen ook bij  $T > T_c$  reeds voornamelijk de lage energieniveaus bezetten, spreekt men enkel voor  $T \leq T_c$  van een macroscopische bezetting en dus van een BEC. Hier is ook duidelijk te zien hoe het aantal atomen in de thermische wolk rond het condensaat afneemt naarmate verder wordt afgekoeld onder  $T_c$  en de piek rond nul scherper wordt. (Overgenomen uit [4])

Sinds hun ontdekking zijn BEC's, zowel theoretisch als experimenteel, al uitgebreid onderzocht. Het zijn namelijk ideale modelsystemen voor het waarnemen van verscheidene kwantumeffecten. Een BEC gedraagt zich volgens de wetten van de kwantummechanica, maar heeft toch macroscopische afmetingen. De golffunctie die het condensaat beschrijft, kan daarom eenvoudig met optische middelen onderzocht worden. Bovendien zijn condensaten makkelijk controleerbaar met lasers en magnetische velden waardoor verschillende parameters van het systeem, zoals interactiesterkte of dichtheid, eenvoudig te regelen zijn. Eén bepaald probleem dat zo diepgaand bestudeerd wordt en ook in dit werk centraal staat, is dat van de polarontoestand. Alvorens polaronen in BEC's te beschouwen, lichten we kort het concept toe zoals oorspronkelijk beschreven in de vaste stof fysica.

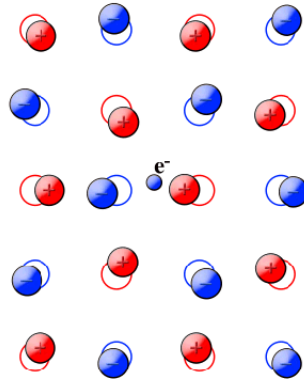
## 1.2 Het Polaron concept

Wanneer een elektron zich in een polariseerbaar medium bevindt, zal het van zijn omgeving afgeschermd worden door een zelf-geïnduceerde polarisatie [7]. In een ionisch kristalrooster interageert de negatieve lading namelijk met de ionen via de Coulomb interactie (figuur 1.3). De positieve ionen worden er door het elektron aangetrokken en negatieve ionen afgestoten. Zulke uitwijkingen van de ionen ten opzichte van hun evenwichtsposities kunnen beschreven

<sup>1</sup>Het lijstje wordt aangevuld met o.a.  $^1\text{H}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{39}\text{K}$ ,  $^{41}\text{K}$ ,  $^{52}\text{Cr}$ ,  $^{84}\text{Sr}$ ,  $^{85}\text{Rb}$ ,  $^{86}\text{Sr}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{170}\text{Yb}$  en  $^{174}\text{Yb}$ .



worden door vibraties van het rooster, ook wel fononen genoemd. Deze vervormingen van het rooster koppelen terug op het elektron zelf, waardoor de mobiliteit ervan daalt. Een elektron maakt het zichzelf door zijn lading moeilijker om door het ionisch rooster te bewegen. Het geheel wordt beschouwd als één entiteit, een deeltje met andere fysieke eigenschappen dan het “gewone” band-elektron. Pekar introduceerde in 1946 de term *polaron* voor dit quasi-deeltje bestaande uit een elektron omgeven door een wolk van fononen [8].



Figuur 1.3: Voorstelling van de polarisatie van een ionisch kristalrooster door een elektron. (Overgenomen uit [9])

In de literatuur onderscheidt men kleine en grote polaronen. Het kleine polaron omschrijft systemen waar de elektron-fonon koppeling sterk is. Het bereik van de storing veroorzaakt door het elektron is slechts van de orde van de roosterconstante. Omdat de polarisatie door het elektron beperkt is tot een volume ter grootte van de eenheidscel, is het polaron gelokaliseerd op een bepaalde plaats in het rooster [7]. Het polaron blijft gelokaliseerd gedurende een tijd  $\omega_{LO}^{-1}$ , de inverse van de constante optische fononfrequentie. Een klein polaron hopt met andere woorden van het ene naar het andere roosterpunt. Grote polaronen daarentegen hebben een straal die vele malen groter is dan de roosterconstante. Ze zijn meer gedelokaliseerd en de *self-trapping* of zelf-opsluiting is nooit volledig [7]. Juist omdat grotere polaronen een lagere kinetische energie hebben, kan de polarisatie de beweging van het elektron volgen. Zo'n polaronen gedragen zich als een vrij elektron met een zwaardere effectieve massa  $m^*$  en vaak ook lagere mobiliteit.

Voor dit werk is voornamelijk het grote polaron belangrijk, daarom wordt er hier nog verder over uitgeweid. De Hamiltoniaan die door Fröhlich werd afgeleid [10] om een groot polaron te beschrijven uitgedrukt in tweede kwantisatie [7]:

$$\hat{H}_{Fr} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}). \quad (1.2)$$

Algemeen stelt dit een deeltje voor met massa  $m$ , impulsoperator  $\hat{p}$  en dichtheidsoperator  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$ , gekoppeld aan een reservoir van bosonen die worden gecreëerd (resp. geannihileerd) door de creatie (annihilatie) operatoren  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  ( $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ ). De eerste term geeft de kinetische

energie weer van de onzuiverheid in het bosonbad en de tweede de energie van de bosonen met dispersierelatie  $\omega_{\mathbf{k}}$ . De laatste term stelt de koppeling voor tussen de bosonen en de onzuiverheid met een interactiesterkte  $V_{\mathbf{k}}$ . Origineel ontwierp Fröhlich zijn Hamiltoniaan voor het systeem zoals hierboven beschreven, nl. een elektron dat koppelt aan longitudinale optische fononen in het rooster. In de literatuur wordt hier vaak naar verwezen als het Fröhlich polaron. Voor dit specifiek geval is dan

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega_{LO} \quad \text{en} \quad V_{\mathbf{k}} = -i \frac{\hbar \omega_{LO}}{k} \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}} \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/4}, \quad (1.3)$$

met  $\omega_{LO}$  de longitudinale optische fononfrequentie en  $\alpha$  de dimensieloze polaronische koppelingsconstante. Voor deze laatste geldt

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

waarbij  $\epsilon_{\infty}$  de permittiviteit is in de limiet van hoge frequenties en  $\epsilon_0$  de vacuüm permittiviteit. Verschillende andere type polaronen worden ook beschreven a.d.h.v. (1.2), zoals daar zijn het *ripplopolaron* [11] dat ontstaat door elektron-ripploon interacties aan het oppervlak van vloeibaar helium, het *plasmaron* gevormd door elektron-plasmon koppeling [12] of het *piëzopolaron* waar een elektron koppelt aan akoestische fononen [13]. De dispersie relatie en interactiesterkte zijn in deze gevallen uiteraard niet hetzelfde als voor het Fröhlich polaron.

Hoewel (1.2) relatief simpel is, bestaat er nog geen exacte oplossing voor, wat betekent dat er voorlopig geen transformatie is die de Hamiltoniaan diagonaliseert. Fröhlich zelf ontwikkelde wel een storingsrekening geldig voor zwakke koppelingen ( $\alpha \ll 1$ ) [10]. Voor hetzelfde regime ontwikkelden Lee, Low and Pines een variationele theorie steunend op een unitaire transformatie die de coördinaten van het elektron weert uit de Hamiltoniaan [14]. Het sterke koppelingsregime werd geanalyseerd op basis van de Born-Oppenheimer benadering, ervan uitgaand dat de elektronen adiabatisch de beweging van de atomen volgen [15, 16]. Feynman besloot nog een stapje verder te gaan en gebruikte zijn padintegraal formalisme voor een theorie geldig bij alle koppelingssterkten [17].

### 1.3 Unitaire dynamica na kwantum quench

Een centrale vraag binnen de kwantummechanica is hoe een veeldeeltjesgolffunctie door unitaire tijdsevolutie een schijnbaar thermisch ensemble kan vormen. Er zijn nog heel wat vragen over welke mechanismen leiden tot thermalisatie en welke karakteristieke tijdschalen hierbij een rol spelen. De link tussen microscopische theorie en effecten op macroscopisch niveau wordt nog niet helemaal begrepen. Een theorie die hierop een antwoord tracht te geven is de *eigentoestand thermalisatie hypothese* (ETH). Deze stelt dat de verwachtingswaarde van een macroscopische observabele ten opzichte van een eigentoestand met energie  $E$  equivalent is aan het gemiddelde over het corresponderende microcanonische ensemble [18]. Deze hypothese zou gelden voor de meeste niet-integreerbare Hamiltonianen en voor operatoren die slechts van een beperkt aantal vrijheidsgraden afhangen, hoewel de exacte limieten van de

hypothese niet gekend zijn. Verwacht wordt dat de hypothese niet opgaat voor integreerbare systemen. Te veel grootheden zouden hier behouden zijn, zodat de dynamica beperkt is in de faseruimte en dus ergodiciteit niet is voldaan [19]. De hypothese blijkt numeriek voor verschillende niet-integreerbare systemen inderdaad te gelden [18]. Het onderzoek naar thermalisatie is de laatste jaren enorm toegenomen, veelal door de mogelijkheid om resultaten te vergelijken met experimenten in ultrakoude gassen. Om dergelijke systemen uit evenwicht te brengen, worden vaak kwantum quenches toegepast. Hierbij wordt een abrupte verandering van één of meerdere parameters in de Hamiltoniaan doorgevoerd. Als men dan aanneemt dat het systeem voor de quench genoeg tijd heeft gehad om te relaxeren, zal het zich kort erna in een toestand ver uit evenwicht bevinden. De dynamica die voortkomt uit kwantum quenches en eventuele thermalisatie is een actief onderzoeksdomein. De reden waarom BEC's hier zo aantrekkelijk zijn, is dat deze gemakkelijk te controleren zijn en de parameters handig afstembaar. Bovendien zijn zulke systemen voldoende geïsoleerd van hun omgeving, zodat enige externe thermalisatie verwaarloosd mag worden. In recent werk van Van Regemortel et al.(2018) werd thermalisatie in ultrakoude atomaire gassen computationeel geïllustreerd a.d.h.v. een quench van de interactiesterkte in een Hamiltoniaan die driedeeltjesinteracties omvatte [20]. Dag et al.(2018) karakteriseerden dan weer verschillende dynamische gedragingen van een spinor-Bose gas na een plotse quench van de kwadratische Zeeman-coëfficiënt [21]. In beide gevallen wordt de dynamica bestudeerd m.b.v. de tijdsevolutie van teloperatoren. De quenches die worden gebruikt in de twee studies zijn voorbeelden van quenches die men met variërende externe magnetische velden ook experimenteel kan realiseren. Dit zijn slechts enkele voorbeelden uit een heel arsenaal aan mogelijke quenches. Een globale quench is trouwens lang niet de enige manier om een systeem uit evenwicht te brengen. De verandering in het systeem kan bijvoorbeeld ook beperkt worden tot een bepaalde regio. Het systeem wordt dan lokaal gequenched. Anderzijds kan men ook de vorm van het systeem plots wijzigen door de opsluitingspotentialiaal te variëren.

## 1.4 Onderzoeksvraag

Een domein waar de vaste stof fysica en de fysica rond ultrakoude gassen samenkomen is dat van het Bose polaron. Algemeen kan een onzuiverheid gekoppeld aan een kwantumreservoir een polaron vormen, zo ook een onzuiverheid in een BEC. Net als het archetype polaron uit de vaste stof fysica bestaat het Bose polaron uit een deeltje en een omgeving van zelf-geïnduceerde fononen, de fundamentele excitaties van het condensaat. Over de vorming van polaronen in een BEC zijn er echter nog veel onzekerheden. Recente studies onderzochten reeds de unitaire dynamica na een kwantum quench van de interactiesterkte tussen een onzuiverheid en bosonen in het condensaat [22, 23]. Hierbij werd wel steeds uitgegaan van een coherente veeldeeltjestoestand. Correlaties tussen verschillende fononmodes worden dan verwaarloosd. Deze verstrengeling tussen excitatiemodes kan echter interessante fysica met zich meebrengen.

De manier waarop, in experimenten die erin slaagden het Bose polaron waar te nemen, vreemde atomen worden geïntroduceerd in een zuiver condensaat heeft veel weg van een kwantum quench. Het systeem is na zo'n quench uiteraard niet langer in evenwicht. Na een

bepaalde relaxatietijd worden dan eigenschappen zoals het energie spectrum van het polaron gemeten. Men gaat ervan uit dat de relaxatietijden lang genoeg zijn, opdat het systeem gethermaliseerd is en dat men dus de grondtoestand van het systeem blootlegt. Voorlopig is er echter nog geen consensus over de karakteristieke tijdschaal waarop het Bose polaron wordt gevormd.

Hierdoor gemotiveerd trachten we in dit werk een beter beeld te vormen van de dynamica van een kwantumonzuiverheid in een BEC vertrekkend van een toestand uit evenwicht na een kwantum quench. Hiervoor zal tot op zekere hoogte rekening gehouden worden met verstrengeling tussen de fononmodes. Er wordt nagegaan wat de invloed is van de aanwezigheid van een onzuiverheid en hoe het systeem evolueert in de tijd. Om ook de vorming in de reële ruimte te illustreren worden dichtheidsprofielen van de thermische bosonen rond de onzuiverheid opgesteld.

## 2 | Een kwantumbeeld

In §1.1 werd Bose-Einstein condensatie kort geïntroduceerd en voornamelijk fenomenologisch besproken. Om de kwantumeffecten te bestuderen, moet dit probleem echter op een microscopisch niveau behandeld worden. De Hamiltoniaan voor een interagerend Bose gas is in tweede kwantisatie [1]

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

De creatie en annihilatie operatoren  $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$  en  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$  creëren resp. annihileren deeltjes. Het bosonische karakter wordt ingevoerd door te stellen dat deze operatoren voldoen aan de commutatierelaties

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0. \quad (2.2)$$

$V_1(\mathbf{r})$  is een externe potentiaal die bijvoorbeeld een harmonische val voorstelt waarin het condensaat opgesloten zit. De laatste term uit (2.1) drukt de interactie energie uit van de bosonen onderling met de interactiepotentiaal  $V_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Zowel de afstand tussen de atomen onderling als hun de Broglie golflengten zijn in een BEC veel groter dan de actieradius van de interatomaire interacties. Dit rechtvaardigt de veronderstelling van een contactpotentiaal  $V_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . De Lippman-Schwinger vergelijking tot op tweede orde in  $g$  linkt de T-matrix aan de interactiesterkte [24]:

$$T(E) = g + g^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \frac{(\hbar k)^2}{2m_r}}. \quad (2.3)$$

Hier is  $E$  de kinetische energie en  $m_r$  de gereduceerde massa van een bepaald verstrooiings-event. In drie dimensies is de T-matrix onafhankelijk van de energie en in de context van BEC's kan men ook steeds de lage energie limiet nemen  $E \rightarrow 0$ , zodat er geldt

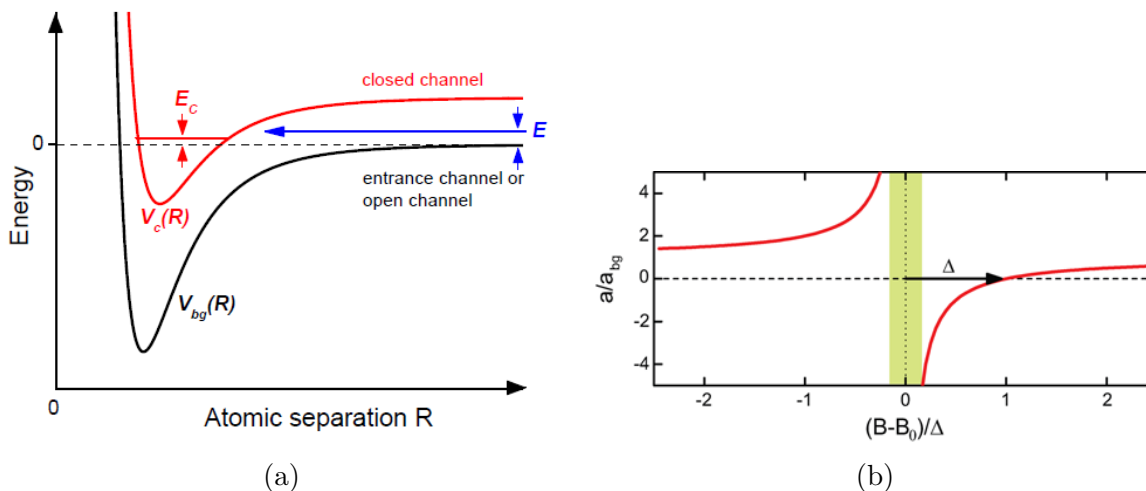
$$\frac{2\pi\hbar^2 a}{\mu V} = g - g^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{2\mu}{(\hbar k)^2}, \quad (2.4)$$

met  $V$  het volume. Het toepassen van de eerste Born-benadering is equivalent aan het benaderen van de Lippman-Schwinger vergelijking tot op eerste orde in  $g$ . Hieruit volgt voor de interactiesterkte van de boson-boson interacties:  $g_{BB} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B V}$ . Deze wordt dus volledig bepaald door de s-golf verstrooiingslengte  $a_{BB}$ .

Eerder werd al aangehaald dat een condensaat makkelijk controleerbaar is. Een voorbeeld hiervan is het kunnen afstemmen van  $a_{BB}$  m.b.v. een extern magnetisch veld  $B$ . Bij verstrooiing van twee deeltjes kan de toestand van de inkomende deeltjes (open channel) namelijk resonant koppelen met een quasi-stationaire gebonden toestand (closed channel), zoals in figuur 2.1a. Als de magnetische momenten van deze twee toestanden verschillen, kan het energieverval  $E_c$  ingesteld worden m.b.v. dit magnetisch veld. De s-golf verstrooiingslengte in de buurt van zo'n resonante koppeling in functie van  $B$  wordt gegeven door

$$a(B) = a_{bg} \left( 1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right). \quad (2.5)$$

Dit fenomeen wordt een Feshbach resonantie genoemd. Figuur 2.1b geeft de uitdrukking voor  $a(B)$  grafisch weer. De breedte van de resonantie is  $\Delta B$  en  $a_{bg}$  is de verstrooiingslengte in afwezigheid van het extern veld  $B$ . Met dit principe kan men dus niet enkel de grootte van  $a$  variëren, maar ook kan het teken ervan veranderen. Zowel aantrekkende als afstotende interacties kunnen met andere woorden gerealiseerd worden in het sterke, zwakke en zelfs unitaire regime. In de plaats van magnetische velden kunnen ook lasers gebruikt worden. Men spreekt dan van optische Feshbach resonanties. Deze geven meer controle over de locatie en breedte van de resonantie. Voor een meer gedetailleerde uiteenzetting van dit type resonantie verwijzen we naar de literatuur [25].



Figuur 2.1: (a) *Two-channel* model dat resonante koppeling toont voor een verstrooiingsevent met energie  $E$ . De toestand van de twee interagerende deeltjes (*open channel*) koppelt met de gebonden toestand met energie  $E_c$  (*closed channel*). Bij een verschil in magnetisch moment tussen de twee kanalen kan met een extern veld  $B$  de koppeling ingesteld worden. (Overgenomen uit [25])

(b) De relatieve verstrooiingslengte  $a/a_{bg}$  in functie van een extern magnetisch veld  $B$ . (Overgenomen uit [26])

## 2.1 Gross-Pitaevskii

Hoe gedraagt zo'n condensaat zich nu eigenlijk? De volledige algemene Hamiltoniaan (2.1) is niet oplosbaar, maar deze kan wel op verschillende niveaus benaderd worden. Bogoliubov kwam met het idee om de fysica van het condensaat los te koppelen van de fysica van de thermische atomen errond door het invoeren van de *verschoven* veldoperatoren [27]

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r})\hat{1} + \hat{\phi}(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

De golffunctie  $\Psi(\mathbf{r})$ , ook wel ordeparameter genoemd, beschrijft het gedrag van het condensaat. De fluctuatie operatoren  $\hat{\phi}(\mathbf{r})$  beschrijven de niet gecondenseerde (of thermische) bosonen. De eenvoudigste benadering neemt enkel de fysica van het condensaat in rekening, dus  $\hat{\psi}(\mathbf{r}) \approx \Psi(\mathbf{r})\hat{1}$ . Alle thermische fluctuaties worden verwaarloosd. De energie van het condensaat is dan

$$E = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_1(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) + \frac{g_{BB}}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r})|^4, \quad (2.7)$$

waar  $V_2$  reeds vervangen is door de contactpotentiaal. De vergelijking voor  $\Psi(\mathbf{r})$  volgt uit de minimalisatie van de energie. Een extra voorwaarde is wel dat het aantal deeltjes  $N = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$  constant blijft. Met de methode van de Lagrange-multiplicatoren wordt dit

$$\frac{\delta E}{\delta \Psi^*} - \mu \frac{\delta N}{\delta \Psi^*} = 0, \quad (2.8)$$

waar  $\mu$  de chemische potentiaal van het systeem is. Voor een uniform Bose gas bij  $T = 0$  geldt dat  $\mu = g_{BB}N_0$ . Substitutie van (2.7) in (2.8) geeft de Gross-Pitaevskii vergelijking voor de macroscopische golffunctie die een perfect condensaat beschrijft bij 0K:

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + \left( V_1(\mathbf{r}) + \frac{4\pi \hbar^2 a_{BB}}{m} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

De vergelijking heeft veel weg van de Schrödinger vergelijking, maar de term met  $|\Psi(\mathbf{r})|^2$  maakt dat ze niet langer lineair is.

Een belangrijke eigenschap van het condensaat is de karakteristieke lengteschaal waarop de ordeparameter varieert. We illustreren dit door het Bose gas te beschrijven in een half-ruimte [28]. In 1D is dit equivalent met een externe potentiaal

$$\begin{cases} V_1(x) = 0 & \text{voor } x \geq 0 \\ V_1(x) = \infty & \text{voor } x < 0. \end{cases} \quad (2.10)$$

Oplossen van (2.9) naar de ordeparameter geeft in dit geval

$$\Psi(x) = \sqrt{n_\infty} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right). \quad (2.11)$$

Hieruit kan men afleiden dat het condensaat vanaf de rand waar de dichtheid  $n = |\Psi(0)|^2 = 0$  herstelt tot zijn bulk  $n_\infty = |\Psi(\infty)|^2$  over een afstand  $\xi$ . Deze afstand wordt de healing- of coherentielengte genoemd en is gedefinieerd als

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi n_\infty a_{BB}}}. \quad (2.12)$$

Afstanden in een BEC worden naar goede gewoonte uitgedrukt in functie van deze karakteristieke lengteschaal.

## 2.2 Bogoliubov benadering

In een volgende stap kunnen ook de thermische fluctuaties aan de beschrijving worden toegevoegd. Een perfect condensaat is praktisch onmogelijk, waardoor zulke fluctuaties altijd zullen voorkomen. Niet langer alle atomen bezetten nu de laagste energietoestand, ook bezettingen van hogere energieniveaus komen voor. Voor temperaturen ver genoeg onder  $T_c$  zijn het wel voornamelijk de lage energieën die een beduidende bijdrage leveren. De thermische bosonen hebben dus zeer kleine momenta. Het is dan vaak overzichtelijker om een Fourier-transformatie door te voeren. De veldoperatoren worden in de Fourier basis gegeven door:

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \text{en} \quad \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.13)$$

Dit is voor een uniform Bose gas in een volume  $V$ . De deeltjesoperatoren  $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$  en  $\hat{b}_{\mathbf{k}}$  creëren resp. annihileren nu deeltjes in een toestand met een welbepaald golfgetal  $\mathbf{k}$ . De Hamiltoniaan van het Bose gas (2.1) in de momentum ruimte schrijven, geeft

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_k \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{g_{BB}}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}, \quad (2.14)$$

met  $\epsilon_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$  de kinetische energie van een vlakke golf met golfgetal  $\mathbf{k}$ . Hier is een uniform gas verondersteld. Bogoliubovs benadering kan nu ook in de Fourierruimte worden toegepast. Hierbij wordt verondersteld dat een condensaat wordt gevormd in de  $\mathbf{k} = 0$  toestand, wat wil zeggen dat een macroscopisch aantal deeltjes zich in deze toestand bevindt. Uitgedrukt in deeltjesoperatoren is dit

$$N_0 = \langle \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 \rangle \quad \text{met} \quad N_0 \gg 1. \quad (2.15)$$

Het loskoppelen van de fysica van het condensaat en de thermische wolk komt in de momentum ruimte overeen met het gelijk stellen van  $\hat{b}_0^\dagger$  en  $\hat{b}_0$  aan  $\sqrt{N_0}$ . Er wordt geredeneerd dat als

$$\hat{b}_0^\dagger |N_0\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \quad (2.16)$$

en

$$\hat{b}_0 |N_0\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle, \quad (2.17)$$



men benaderend kan stellen dat

$$\hat{b}_0^\dagger \approx \sqrt{N_0} \quad \text{en} \quad \hat{b}_0 \approx \sqrt{N_0}. \quad (2.18)$$

Het operator karakter wordt hier niet langer expliciet weergegeven. Deze  $\sqrt{N_0}$  is het analoog van de condensaat golffunctie  $\Psi(\mathbf{r})$  uit §2.1. Door de fluctuaties opnieuw te verwaarlozen, vindt men gemakkelijk de energie van de grondtoestand van het uniforme condensaat, ook wel Gross-Pitaevskii energie genoemd:

$$E_{GP} = \frac{g_{BB}N_0^2}{2}. \quad (2.19)$$

Dit is de potentiële energie van de  $N_0$  deeltjes in het condensaat. De kinetische energie is nul, gezien voor alle gecondenseerde deeltjes geldt dat  $\mathbf{k} = 0$ . De deeltjesoperatoren  $\hat{b}_\mathbf{k}^\dagger$  en  $\hat{b}_\mathbf{k}$  met  $\mathbf{k} \neq 0$  geven de thermische fluctuaties weer. Omdat deze fluctuaties in het algemeen zeer klein verondersteld worden voor temperaturen ver onder  $T_c$ , kan  $N_0$  bijgevolg als constant beschouwd worden. In de Hamiltoniaan uit vgl.(2.14) verwaarloost men overigens de termen die meer dan kwadratisch zijn in deeltjesoperatoren:

$$\hat{H} = \frac{g_{BB}N_0^2}{2} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_k \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger \hat{b}_\mathbf{k} + 2g_{BB}N_0 \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger \hat{b}_\mathbf{k} + \frac{g_{BB}N_0}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \left( \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_\mathbf{k} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \right). \quad (2.20)$$

De tweede term is niets anders dan de kinetische energie van de thermische deeltjes. De derde term is eigenlijk de som van de Hartree en Fock interactietermen. De Hartree energie is afkomstig van de interactie tussen een thermisch boson en een condensaat boson. De Fock energie, of *exchange* energie, komt van een deeltje met impuls  $\hbar\mathbf{k}$  dat in de gecondenseerde toestand verstrooit gelijktijdig met een deeltje dat uit het condensaat wordt gekickt en een impuls  $\hbar\mathbf{k}$  krijgt. Omdat voor de interactie een contactpotentiaal werd genomen, zijn deze bijdragen gelijk, vandaar de factor twee. De laatste term geeft de bijdragen van verstrooiing van twee condensaatatomen naar de thermische wolk met hun resulterende momenta tegengesteld aan elkaar en het inverse proces waarbij twee thermische atomen met tegengestelde momenta in het condensaat worden verstrooid [1]. Iets dat tot nu over het hoofd werd gezien is dat met deze Hamiltoniaan het totaal aantal deeltjes niet behouden is. Dit kan worden opgelost door opnieuw de chemische potentiaal  $\mu$  in te voeren:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \hat{H} - \mu \hat{N} \\ &= \frac{g_{BB}N_0^2}{2} - \mu N_0 + \sum_{\mathbf{k}}' (\epsilon_k + g_{BB}N_0) \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger \hat{b}_\mathbf{k} + \frac{g_{BB}N_0}{2} \sum_{\mathbf{k}}' \left( \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_\mathbf{k} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Hier hebben we de substitutie  $\sum_{\mathbf{k} \neq 0} \rightarrow \sum_{\mathbf{k}}'$  doorgevoerd. Deze Hamiltoniaan kan, in tegenstelling tot (2.14), wel analytisch opgelost worden. Met andere woorden  $\tilde{H}$  kan gediagonaliseerd worden a.d.h.v. een basistransformatie. De canonische transformatie in kwestie werd net als de toegepaste benadering naar Bogoliubov vernoemd<sup>1</sup> en bestaat erin de Hamiltoniaan te schrijven in functie van de operatoren  $\hat{\alpha}_\mathbf{k}^\dagger$  en  $\hat{\alpha}_\mathbf{k}$ :

$$\hat{\alpha}_\mathbf{k}^\dagger = u_k \hat{b}_\mathbf{k}^\dagger - v_k \hat{b}_{-\mathbf{k}}; \quad \hat{\alpha}_\mathbf{k} = u_k \hat{b}_\mathbf{k} - v_k \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger; \quad (2.22)$$

<sup>1</sup>Hij gebruikte de transformatie voor het eerst in zijn onderzoek naar condensatie in vloeibaar helium [27].

met de Bogoliubov coëfficiënten

$$u_k = \sqrt{\frac{\epsilon_k + gn_0}{2\omega_k} + \frac{1}{2}}; \quad v_k = -\sqrt{\frac{\epsilon_k + gn_0}{2\omega_k} - \frac{1}{2}}. \quad (2.23)$$

Deze operatoren creëren en annihileren respectievelijk de elementaire excitaties van het condensaat met energiespectrum

$$\hbar\omega_k = \sqrt{\epsilon_k(\epsilon_k + 2gn_0)} = \frac{\hbar^2 k}{2m} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}. \quad (2.24)$$

Uit (2.22) volgt ook dat

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \quad \text{en} \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{q}}] = [\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger] = 0. \quad (2.25)$$

De nieuwe operatoren voldoen aan de bosonische commutatierelaties. Simpelweg substitueren van

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = u_k \hat{a}_{\mathbf{k}} + v_k \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \quad (2.26)$$

in vlg.(2.21) geeft de gewenste diagonalisatie:

$$\hat{H}_{\text{Bog}} = E_{GPB} + \sum_{\mathbf{k}}' \hbar\omega_k \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (2.27)$$

De energie van de grondtoestand, ook wel *Gross-Pitaevskii-Bogoliubov* energie genoemd, is

$$E_{GPB} = \frac{g_{BB}N_0^2}{2} - \mu N_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}}' (\epsilon_k + g_{BB}N_0 - \hbar\omega_k). \quad (2.28)$$

Het gas gedraagt zich dus als een systeem van bosonische (quasi-)deeltjes die niet met elkaar interageren. De aard van de elementaire excitaties is afhankelijk van hun golfgetal. Voor lage energiemodes (excitaties met kleine golfgetallen) geldt namelijk dat

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \hbar\omega_k = \hbar k \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 a_s n_0}{m^2}}. \quad (2.29)$$

Laagenergetische excitaties zijn geluidsgolven doorheen het condensaat. Hun energie neemt namelijk toe evenredig met het golfgetal. De geluidssnelheid is

$$c = \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 a_s n_0}{m^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\xi}. \quad (2.30)$$

De karakteristieke tijdschaal voor effecten binnen een condensaat is dan gedefinieerd als de tijd nodig om aan de geluidssnelheid de karakteristieke lengte af te leggen:  $\xi/c$ . Hoogenergetische excitaties komen wel overeen met afzonderlijke, vrije deeltjes. Het spectrum in de limiet van grote golfgetallen is namelijk

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \infty} \hbar\omega_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \epsilon_k. \quad (2.31)$$

De excitatie is niet langer een geluidsgolf, maar een enkel deeltje dat uit het condensaat wordt gekickt.

De grondtoestand van deze Hamiltoniaan is een gecondenseerd Bose gas zonder elementaire excitaties ( $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0$ ), maar het is daarom nog geen perfect condensaat. De verwachtingswaarde van het aantal thermische atomen uitgedrukt in de Bogoliubov basis is

$$\begin{aligned}\hat{N}_{th} &= \sum_{\mathbf{k}}' (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}})(u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}}' v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}}' \left[ (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2)\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}) \right].\end{aligned}\tag{2.32}$$

Zelfs in de grondtoestand, een vacuüm van quasi-deeltjes, is er een zogenaamd kwantumdepletie ( $N_{qd}$ ) van het condensaat door interacties tussen de bosonen:

$$N_{qd} = \sum_{\mathbf{k}}' v_{\mathbf{k}}^2.\tag{2.33}$$

## 2.3 Driedeeltjesinteracties

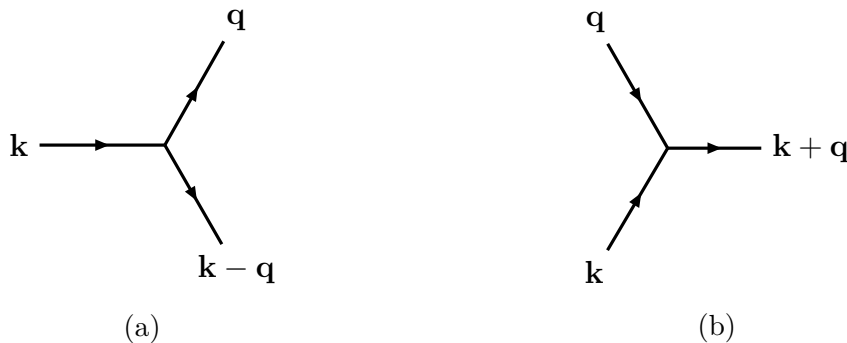
Tot nu toe werden de termen van derde en vierde orde in fluctuatie operatoren niet in rekening gebracht. De elementaire excitaties zijn hierdoor onafhankelijk van elkaar, d.w.z. er is geen koppeling tussen excitatiemodes met verschillende golfgetallen  $\mathbf{k}$ . Deze benadering is goed voor temperaturen dicht bij het absolute nulpunt. Naarmate de temperatuur stijgt, neemt de invloed van hogere orde effecten echter toe. Wanneer de temperatuur de kritische temperatuur nadert, zullen ook de interacties tussen excitaties onderling een significante invloed hebben. De Hamiltoniaan in (2.27) is dan geen goede voorstelling meer voor het Bose gas. Een eerste correctie op de Bogoliubov benadering neemt driedeeltjesinteracties op in het beeld, wat leidt tot Beliaev en Landau verstrooiing. De Hamiltoniaan met inclusie van de derde orde termen is dan:

$$\hat{H} \approx E_{GPB} + \hat{H}_2 + \hat{H}_3,\tag{2.34}$$

waarbij

$$\hat{H}_3 = g_{BB}\sqrt{N_0} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \neq 0; \mathbf{k} \neq \mathbf{q}} (\hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{q}}).\tag{2.35}$$

De grondtoestandsenergie  $E_{GPB}$  en de kwadratische termen zijn het onderwerp van de vorige sectie. Het eerste deel van  $\hat{H}_3$  representeert het Beliaev verstrooiingsproces waarbij een geëxciteerd boson met momentum  $\mathbf{k}$  botst met een condensaat atoom. Het resultaat zijn twee fluctuaties met een lagere energie, i.e. met momenta  $\mathbf{k} - \mathbf{q}$  en  $\mathbf{q}$ . Het omgekeerde proces, voorgesteld door de tweede term, is dan Landau verstrooiing. Hier botsen twee bosonen met momenta  $\mathbf{k}$  en  $\mathbf{q}$  waarna één ervan in het condensaat terecht komt en de andere eindigt met momentum  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ . In figuur 2.2 staan beide processen schematisch voorgesteld.



Figuur 2.2: Diagrammatische voorstelling van Beliaev (a) en Landau (b) verstrooiing in de basis van de atomen.

Om meer inzicht te verwerven, kan ook hier de Bogoliubov transformatie (2.26) toegepast worden. In de basis van fundamentele excitaties is

$$\hat{H}_3 = g_{BB}\sqrt{N_0} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q} \neq 0; \mathbf{k} \neq \mathbf{q}} [A_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}} + B_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{a}_{-\mathbf{q}-\mathbf{k}} + H.C.], \quad (2.36)$$

waarbij

$$A_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} u_k u_q + v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_k v_q + (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})(v_q u_k + v_k u_q), \quad (2.37)$$

$$B_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = v_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} v_q u_p + v_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} u_p u_q. \quad (2.38)$$

Deze derde orde termen hebben als gevolg dat de verschillende excitatiemodes koppelen. Waar de excitaties in het Bogoliubov beeld niet konden vervallen, gebeurt dat in dit systeem wel. Een excitatie kan uiteenvallen in meerdere excitaties met kleinere momenta en verschillende excitaties kunnen combineren tot één excitatie. De driedeeltesinteracties maken dat de elementaire excitaties een eindige levensduur hebben. Beliaev en Landau damping worden algemeen voorspeld voor te komen in kwantumvloeistoffen (BEC's, supergeleiders, superfluida) en werden ook experimenteel waargenomen in ultrakoude atomaire gassen [29]. Ondanks dat zulke hogere orde effecten zeer interessante fysica teweegbrengen, zullen ze in dit werk steeds verwaarloosd worden. De dynamica gedreven door de Beliaev en Landau termen staat in verschillende andere studies wel centraal [30, 31].

## 2.4 Het Bose Polaron

In wat voorafging werden enkel zuivere atomaire gassen besproken. Heel wat interessante eigenschappen doen zich echter voor wanneer er onzuiverheden optreden in een condensaat. Het systeem bevat dan deeltjes die men kan onderscheiden van de bosonen die het BEC vormen. Een voorbeeld hiervan is een *spinor-Bose gas* dat experimenteel wordt gerealiseerd door gebruik te maken van het Zeeman-effect om met een magnetische puls de hyperfijn-niveaus van een fractie van de condensaat atomen te veranderen [32]. Anderzijds kan men ook fundamenteel verschillende deeltjes, zoals bosonen en fermionen of twee verschillende

atomaire soorten, combineren. De Hamiltoniaan in tweede kwantisatie voor een homogeen BEC met een enkele onzuiverheid wordt in zijn algemeenheid gegeven door

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{g_{BB}}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{IB}(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}}. \quad (2.39)$$

De eerste twee termen stellen het zwak interagerend, zuiver Bose gas voor. De derde term is de kinetische energie van de onzuiverheid en de laatste term is de energie van de interactie tussen de onzuiverheidsdichtheid  $\hat{\rho}_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$  en de dichtheid van het boson-bad. Ervan uitgaand dat de temperatuur ver onder  $T_c$  ligt en er dus een BEC gevormd is, kan de Bogoliubov benadering (2.18) toegepast worden. De laatste term uit (2.39) kan dan geschreven worden als volgt:

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{IB}(\mathbf{q}) \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} = g_{IB} N_0 \hat{\rho}_0 + g_{IB} \sqrt{N_0} \sum_{\mathbf{k}}' \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \left( \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) + g_{IB} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}' \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}}. \quad (2.40)$$

In het geval dat  $N_0 \gg 1$  is de bijdrage van de laatste term in deze uitdrukking verwaarloosbaar klein t.o.v. de anderen. Het doorvoeren van de Bogoliubov transformatie zal de Hamiltoniaan niet langer diagonaliseren, maar toont wel de invloed van de extra term op de elementaire excitaties. Geschreven in de basis van  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  en  $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$  is (2.39)

$$\hat{H} = E_{GPB} + g_{IB} N_0 + \sum_{\mathbf{k}}' \hbar \omega_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k}}' U_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right), \quad (2.41)$$

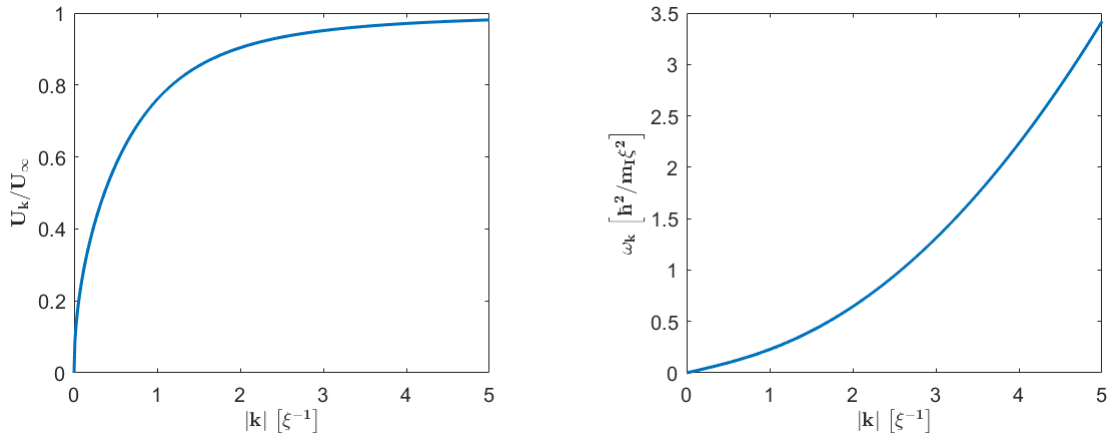
met

$$U_{\mathbf{k}} = g_{IB} \sqrt{N_0} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}) = g_{IB} \sqrt{N_0} \left( \frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2} \right)^{1/4}. \quad (2.42)$$

Het valt nu op dat een soortgelijke uitdrukking ook voorkwam in §1.2. De Hamiltoniaan voor een onzuiverheid in een zwak interagerend Bose gas lijkt in de Bogoliubov benadering overeen te komen met de Hamiltoniaan voor een Fröhlich polaron uit de vaste stof fysica. Net als het elektron in een kristalrooster wordt de onzuiverheid in een gecondenseerd Bose gas beïnvloed door een zelf-geïnduceerde verstoring. De fononen, in dit geval de fundamentele Bogoliubov excitaties, koppelen terug op de onzuiverheid en vormen samen een polaron. Vandaar ook de veel gebruikte term *Bose polaron*.

Om een specifiek systeem te beschrijven, moeten in uitdrukking (2.41) nog verschillende parameters ( $m_I$ ,  $n_0$ ,  $a_{IB}$ ,  $a_{BB}$ , ...) gekozen worden. Wanneer echter alle grootheden worden uitgedrukt in polaronische eenheden, moeten er de facto slechts twee verhoudingen gekend zijn. Omvormen naar polaronische eenheden komt overeen met het gelijkstellen van  $\hbar$ ,  $m_I$  en  $\xi$  aan 1. Tabel 2.1 geeft een overzicht van de eenheden waarin verschillende grootheden dan worden uitgedrukt. De dispersierelatie voor de excitaties (2.24) in polaronische eenheden is dan

$$\omega_{\mathbf{k}} = \frac{k}{2m_B} \sqrt{k^2 + 2}. \quad (2.43)$$



Figuur 2.3: Het relatieve verloop van de boson-onzuiverheid interactiesterkte  $U_k$  (links) en de Bogoliubov dispersierelatie  $\omega_k$  (rechts). Voor deze laatste werd  $m_B = 3.8m_I$  genomen.

De Lippman-Schwinger vergelijking (2.4) tot op eerste orde in de interactiesterkte  $g_{IB}$  zegt dat  $g_{IB} = \frac{2\pi\hbar^2 a_{IB}}{V m_r}$ , met  $m_r$  de gereduceerde massa voor de boson-onzuiverheid interactie:  $m_r = \left(\frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_I}\right)^{-1}$ . Hiermee de interactiesterkte herschrijven en uitdrukken in polaronische eenheden geeft dat

$$U_k = \sqrt{\frac{\pi}{2\mu^2 V}} \left(\frac{(\alpha k)^2}{k^2 + 2}\right)^{1/4}. \quad (2.44)$$

Het hele systeem wordt nu gekarakteriseerd door de verhouding van de massa's  $m_B/m_I$  en een dimensieloze polaronische koppelingsconstante

$$\alpha = \frac{a_{IB}^2}{a_{BB}\xi}. \quad (2.45)$$

Figuur 2.3 toont de interactiesterkte en Bogoliubov dispersie relatie in functie van het golfgetal. De Hamiltoniaan (2.41) hangt niet expliciet af van de temperatuur, maar de benaderingen in de aanloop ernaartoe leggen wel beperkingen op. De temperatuur moet laag genoeg zijn, opdat het aantal excitaties in de buurt van de onzuiverheid verwaarloosbaar klein is ten opzichte van het aantal condensaat atomen. Kwantitatief uit dit zich in een grens op de interactiesterkte [33]

$$|g_{IB}| \ll 4c\xi^2. \quad (2.46)$$

De geluidssnelheid in het condensaat  $c$  en de coherentielengte  $\xi$  kwamen eerder al aan bod.

Hoewel er weinig twijfel bestond over het bestaan van een Bose polaron, werd de toestand pas recent ook experimenteel waargenomen. Twee parallele experimenten voerden metingen uit van het energiespectrum van een Bose polaron door gebruikt te maken van radiofrequentie (RF) spectroscopie. Jørgensen et al.(2016) prepareerden hiervoor een BEC van  $^{39}\text{K}$ -atomen

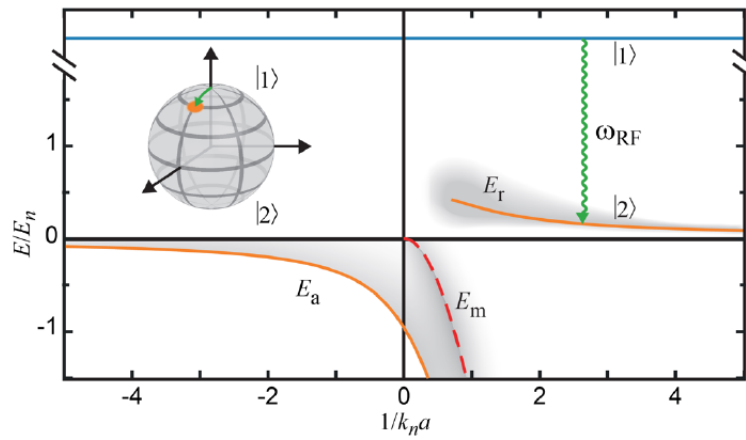
in een harmonische val bij 160 nK ( $T/T_c \approx 0,6$ ). Met een RF-puls van 100  $\mu\text{s}$  werd de hyperfijn-toestand van een fractie van de atomen aangepast van  $|1\rangle = |F=1, m_F=-1\rangle$  naar  $|2\rangle = |1, 0\rangle$  [34]. De onderlinge interactie tussen atomen in toestand  $|1\rangle$  wordt zwak gehouden ( $a_{BB} \approx 9a_0$ ). De deeltjes in toestand  $|2\rangle$  beschouwt men als onzuiverheden. De interactie met de condensaat atomen gekarakteriseerd door  $a_{IB}$  is afstembaar rond een Feshbach resonantie. Het polaron effect manifesteert zich als een verschuiving van de energie van de RF-puls. Bovenop de hyperfijnenergie van  $|1\rangle$  naar  $|2\rangle$  moet ook de polaronenergie geabsorbeerd worden, opdat resonantie optreedt. De polaronenergie die afhangt van de s-golf verstrooiingslengte  $a_{IB}$  is in figuur 2.4 weergegeven als de oranje curve. De energie wordt daar uitgedrukt in de eenheid  $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m_B$  met  $k_n = (6\pi^2 n_0)^{1/3}$ . De grijze tint in de figuur geeft een continuüm van veeldeeltjestoestanden aan. Voor zowel aantrekkend als afstotend zwakke interacties (resp.  $1/k_n a \gg 1$  en  $1/k_n a \ll -1$ ) is de polaron toestand duidelijk onderscheidbaar. Het spectrale gewicht verschuift bij sterkere interacties meer en meer naar het veeldeeltjescontinuüm. De rode stippenlijn geeft de moleculaire bindingsenergie weer.

Gelijktijdig met dit experiment werden ook aan het JILA in Colorado Bose polaronen experimenteel waargenomen door Hu et al.(2016). Zij voerden eveneens metingen van het energiespectrum uit a.d.h.v. RF-spectroscopie. Een belangrijk verschil is wel dat de onzuiverheid hier een fundamenteel verschillend deeltje was en niet een andere hyperfijn-toestand van hetzelfde atoom. Een mengsel van  $^{87}\text{Rb}$ - en  $^{40}\text{K}$ -atomen werd door hen afgekoeld tot 180 nK in een harmonische val. In het centrum van de val was de dichtheid aan fermionen 1% van de dichtheid aan bosonen. De boson-boson interactie was in dit experiment iets sterker ( $a_{BB} = 100a_0$ ), maar nog steeds binnen het zwakke regime. De boson-fermion interactie kon ook hier afgesteld worden rond een Feshbach resonantie voor de Rb bosonen in de  $|1, 1\rangle$  hyperfijn-toestand en de K fermionen in de  $|9/2, -9/2\rangle$  toestand. De RF-puls werd hier gebruikt om de kalium atomen vanuit hun initiële, zwak interagerende toestand  $|9/2, -7/2\rangle$  te transformeren. Net als in het eerste experiment is de polaronenergie bepalend voor de frequentie van de RF-puls waarbij resonantie optreedt. De gemeten spectraal functie kent een gelijkaardig verloop als in figuur 2.4.

Tabel 2.1: Samenvatting van de eenheden waarin verschillende grootheden worden uitgedrukt wanneer gewerkt wordt in polaronische eenheden. De kolom rechts geeft de waarden voor deze eenheden in het geval van een  $^{40}\text{K}$ -onzuiverheid in een BEC van  $^{87}\text{Rb}$ -atomen met  $n_0 = 1.8 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  en  $a_{BB} = 100a_0$  [35].

Grootheid	Pol. Eenheid	$^{40}\text{K}$ in $^{87}\text{Rb}$ -BEC
Lengte	$\xi$	204nm
Massa	$m_I$	$6.49 \times 10^{-26} \text{kg}$
Momentum	$\frac{\hbar}{\xi}$	$5.16 \times 10^{-28} \text{kg.m/s}$
Energie	$\frac{\hbar^2}{m_I \xi^2}$	$4.10 \times 10^{-30} \text{J}$
Tijd	$\left(\frac{\hbar}{m_I \xi^2}\right)^{-1}$	25.7 $\mu\text{s}$

<sup>2</sup>In de thesis verwijst  $n_0$  meestal naar een uniforme condensaatdichtheid. Hier is dit echter de dichtheid in het centrum van de harmonische val.



Figuur 2.4: Schematische voorstelling van de spectraal functie. De oranje lijnen tonen de aantrekkende ( $E_a$ ) en afstotende ( $E_r$ ) polarontoestanden. De grijze tint stelt een continuüm aan veeldeeltjestoestanden voor. In het unitair afstotend regime is er ook een moleculaire toestand ( $E_m$ ) die door het aantrekkend polaron wordt ontweken. (Overgenomen uit [34])



### 3 | Eigenschappen van het Bose polaron in evenwicht

In de literatuur zijn verschillende aanpakken terug te vinden om de eigenschappen van een Fröhlich Hamiltoniaan bij evenwicht te bestuderen. Het koppelingsregime waarbinnen een oplossing geldig is, hangt af van de toegepaste methode. In dit hoofdstuk wordt op zoek gegaan naar de grondtoestand van het Bose-polaron in het zwakke koppelingsregime. Hiervoor wordt de methode van Lee, Low en Pines toegepast. De techniek, die door hen in 1953 werd voorgesteld, bestaat uit een transformatie naar het referentiestelsel van de onzuiverheid en een variationele ansatz voor de golffunctie van de grondtoestand [14]. De eigenschappen van de grondtoestand tonen aan hoe de onzuiverheid het condensaat verstoort, maar ook hoe dit terugkoppelt en een polaron vormt. Bovendien is dit een goede referentie voor de resultaten die worden bekomen in hoofdstuk 4. De uitwerking verloopt analoog aan deze in Ref. [33], maar is aangepast aan het specifieke systeem dat hier wordt behandeld.

Eerst wordt dus een canonische transformatie toegepast die de coördinaten van de onzuiverheid weert uit de Hamiltoniaan [7]:

$$\hat{U}_{LLP} = \exp(-i\hat{S}), \quad \text{met} \quad \hat{S} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (3.1)$$

Om het effect te bepalen van deze transformatie op de verschillende termen kan handig gebruik gemaakt worden van de Baker-Campbell-Hausdorff relatie. De preciese uitwerking is terug te vinden in Appendix A. Na transformatie vinden we de Lee-Low-Pines Hamiltoniaan

$$\begin{aligned} \hat{H}_{LLP} &= \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{H}_{Bog} \hat{U}_{LLP} \\ &= E_{GPB} + g_{IB} N_0 + \frac{1}{2m_I} \left( \hat{\mathbf{p}}_I - \sum_{\mathbf{k}}' \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right)^2 + \sum_{\mathbf{k}}' \left[ \omega_k \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + U_k \left( \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Een merkwaardig gevolg is dat de impulsoperator van de onzuiverheid commuteert met de volledige Hamiltoniaan:  $[\hat{\mathbf{p}}_I, \hat{H}_{LLP}] = 0$ . Dit was niet het geval vóór de LLP-transformatie ( $[\hat{\mathbf{p}}_I, \hat{H}_{Bog}] \neq 0$ ). De eigentoestanden van  $\hat{\mathbf{p}}_I$  zijn dus ook eigentoestanden van de volledige Hamiltoniaan  $\hat{H}_{LLP}$ . Er kan gesteld worden dat de eigentoestand van de onzuiverheid een vlakke golf zal zijn met impuls  $\mathbf{p}_I$ . Gezien het systeem conservatief is, kan het operator karakter hier verwaarloosd worden en  $\hat{\mathbf{p}}_I$  vervangen worden door de eigenwaarde. Merk op

dat de LLP-transformatie tot nu toe geen verdere benadering maakt in het systeem, d.w.z.  $\hat{H}_{Bog}$  en  $\hat{H}_{LLP}$  zijn volledig equivalent. Deze laatste maakt gewoon handig gebruik van de symmetrie van het systeem en drukt het geheel uit in functie van slechts één soort operator. De uitdrukking kan men nog verder vereenvoudigen door het totale momentum van het systeem gelijk aan nul te stellen. De Hamiltoniaan die overblijft is in dat geval

$$\hat{H}_{LLP} = E_0 + \frac{1}{2m_I} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{s}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} + \sum'_{\mathbf{k}} \left[ \omega_k \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + U_k \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right], \quad (3.3)$$

waar we de verkorte notatie  $E_0 = E_{GPB} + g_{IB} N_0$  toepassen. Het nadeel van deze transformatie naar het referentiestelsel van het polaron is dat opnieuw een niet-lineaire term in Bogoliubov operatoren verschijnt. Deze beschrijft hoe de fononen met elkaar interageren via de interactie met de onzuiverheid.

In een volgende stap wordt de grondtoestand benaderd door een coherente toestand via de variationele ansatz [7]

$$|\varphi\rangle = \hat{U}_{var} |0\rangle = \exp \left\{ \sum'_{\mathbf{k}} [\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger f(\mathbf{k}) - \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} f^*(\mathbf{k})] \right\} |0\rangle. \quad (3.4)$$

Deze vorm voor de golffunctie steunt op de zogenaamde benadering van intermediaire koppeling waarbij men ervan uitgaat dat de door de onzuiverheid geïnduceerde fononen onafhankelijk van elkaar gecreëerd worden. Er zijn geen correlaties tussen excitaties van verschillende energieën. Net zoals  $\hat{H}_{LLP}$  is  $|\varphi\rangle$  uitgedrukt in het polaron referentiestelsel. Terug transformeren naar het lab-frame geeft  $|\varphi_{lab}\rangle = \hat{U}_{LLP}^{-1} |\varphi\rangle \otimes |0\rangle_I$ . De variationele functionaal  $f(\mathbf{k})$  wordt bepaald door de energie van de grondtoestand te minimaliseren.  $U$  is een unitaire transformatie ( $\hat{U}_{var}^{-1} \hat{U}_{var} = \hat{1}$ ), wat maakt dat de golffunctie genormeerd is. Verder volgt opnieuw uit de Baker-Campbell-Hausdorff formule (A.2) dat

$$\hat{U}_{var}^{-1} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{U}_{var} = \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger + f^*(\mathbf{k}) \quad \text{en} \quad \hat{U}_{var}^{-1} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{var} = \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + f(\mathbf{k}). \quad (3.5)$$

Hiermee kan men de energie van de grondtoestand vinden:

$$E_G = \langle \varphi | \hat{H}_{LLP} | \varphi \rangle = E_0 + \frac{1}{2m_I} \left[ \sum'_{\mathbf{k}} \mathbf{k} |f(\mathbf{k})|^2 \right]^2 + \sum'_{\mathbf{k}} \left( \omega_k + \frac{k^2}{2m_I} \right) |f(\mathbf{k})|^2 + \sum'_{\mathbf{k}} U_k [f(\mathbf{k}) + f^*(\mathbf{k})]. \quad (3.6)$$

Om  $f(\mathbf{k})$  te bepalen, nemen we de voorwaarde van energiminimalisatie,  $\delta E / \delta f^* = 0$ , resulterend in de vergelijking

$$\frac{1}{m_I} \sum'_{\mathbf{q}} \mathbf{q} |f(\mathbf{q})|^2 f(\mathbf{k}) + \left( \omega_k + \frac{k^2}{2m_I} \right) f(\mathbf{k}) + U_k = 0 \quad (3.7)$$

De complementaire vergelijking voor  $f^*(\mathbf{k})$  is identiek, dus kunnen we al zeggen dat dit een reële functie van  $\mathbf{k}$  zal zijn. Verder introduceerde Lee, Low en Pines de mean-field

fononimpuls gedefiniëerd als  $\mathbf{P}_{MF} = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} |f(\mathbf{q})|^2$  [33]. In het geval van een onzuiverheid met een initiële impuls  $\mathbf{p}_I \neq 0$  wordt deze zelfconsistent bepaald, maar omdat we werken met een dynamische onzuiverheid startend in rust ( $\mathbf{p}_I = 0$ ) krijgen we een sferisch symmetrisch probleem waarvoor geldt  $\mathbf{P}_{MF} = 0$  zodat

$$f(\mathbf{k}) = -\frac{U_k}{\Omega_k}; \quad \Omega_k = \omega_k + \frac{k^2}{2m_I}. \quad (3.8)$$

Met deze coherente amplitudes is de grondtoestandenergie vervolgens

$$E_G = E_{GPB} + g_{IB}N_0 - \sum_{\mathbf{k}}^{\Lambda} \frac{U_k^2}{\Omega_k}. \quad (3.9)$$

Een cut-off  $\Lambda$  moet hier geïntroduceerd worden omdat de laatste term divergent is. Deze UV cut-off is gerelateerd aan het eindige bereik van interatomaire potentiaal. Dit bereik schaalt met de Van der Waals straal  $r_0$  volgens  $\Lambda \sim 1/r_0$ . Uitgedrukt in functie van  $\xi^{-1}$  is deze cut-off typisch van de orde  $\Lambda \sim 100$  [36]. De UV divergentie wordt geannuleerd door de interactiesterkte  $g_{IB}$  te renormaliseren. Aangezien  $U_k \sim g_{IB}^2$  wordt de correcte link met de verstrooiingslengte  $a_{IB}$  bekomen via de tweede orde benadering van de Lippman-Schwinger vergelijking:

$$\frac{2\pi a_{IB}}{Vm_r} = g_{IB} - g_{IB}^2 \sum_{\mathbf{k}}^{\Lambda} \frac{2m_r}{k^2} \quad (3.10)$$

Substitutie van deze gelijkheid en de interactiesterkte (2.42) geeft dat

$$E_G = E_{GPB} + \frac{2\pi a_{IB}n_0}{m_r} + g_{IB}^2 N_0 \sum_{\mathbf{k}}^{\Lambda} \frac{2m_r}{k^2} - \sum_{\mathbf{k}}^{\Lambda} \frac{U_k^2}{\Omega_k}. \quad (3.11)$$

Beide sommaties kunnen in de thermodynamische limiet als integraal geschreven worden zodat

$$E_G = E_{GPB} + \left(\frac{\pi n_0 \alpha}{2m_r^2 \xi}\right)^{1/2} + \frac{g_{IB}^2 m_r N_0 V}{\pi^2} \Lambda - \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|k| < \Lambda} d\mathbf{k} \frac{U_k^2}{\Omega_k}. \quad (3.12)$$

Hernormaliseren van de interactiesterkte verwijdert efficiënt de divergentie in de energie. De laatste term volledig uitschrijven geeft namelijk dat [33]

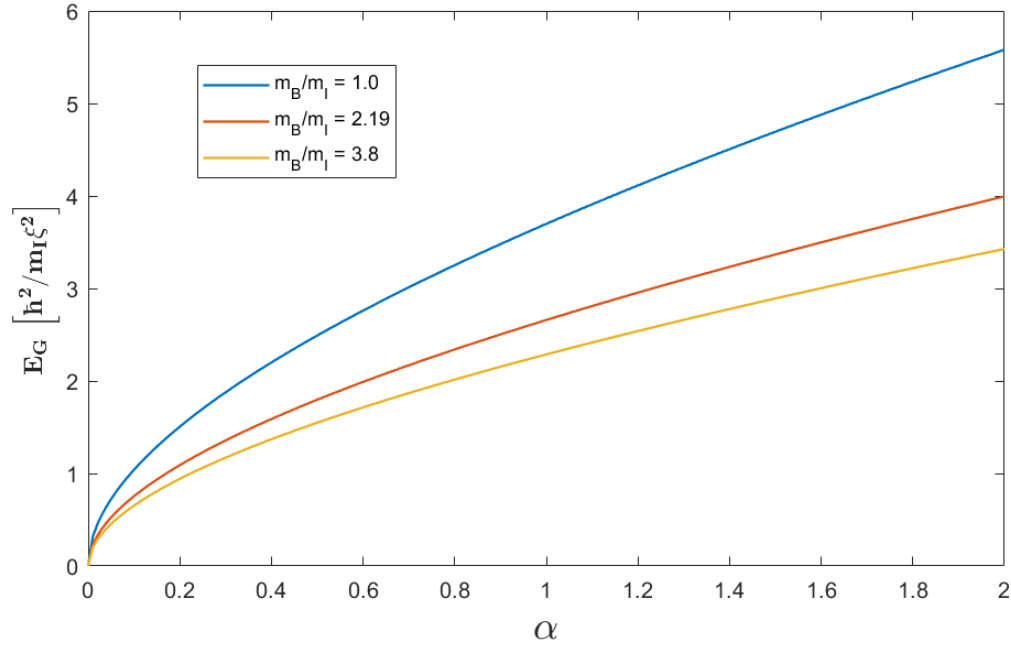
$$\frac{g_{IB}^2 N_0 V}{2\pi^2} \int_0^{\Lambda} \frac{k}{\frac{k}{2m_B}(k^2 + 2) + \frac{k^2}{2m_I} \sqrt{k^2 + 2}} k^2 dk \underset{\Lambda \text{ groot}}{\approx} \frac{g_{IB}^2 m_r N_0 V}{\pi^2} \Lambda \quad (3.13)$$

Figuur 3.1 toont de polaron energie in functie van de koppelingsconstante  $\alpha$  voor verschillende verhoudingen van de massa's  $m_B/m_I$ . De dichtheid en s-golf verstrooiingslengte  $a_{BB}$  zijn hier gekozen naar analogie met het experiment van Hu et al.(2016) (zie tabel 2.1). De offset van de energie  $E_{GPB}$  is in de grafiek gelijkgesteld aan nul en een cut-off  $\Lambda = 200\xi^{-1}$  is gekozen.

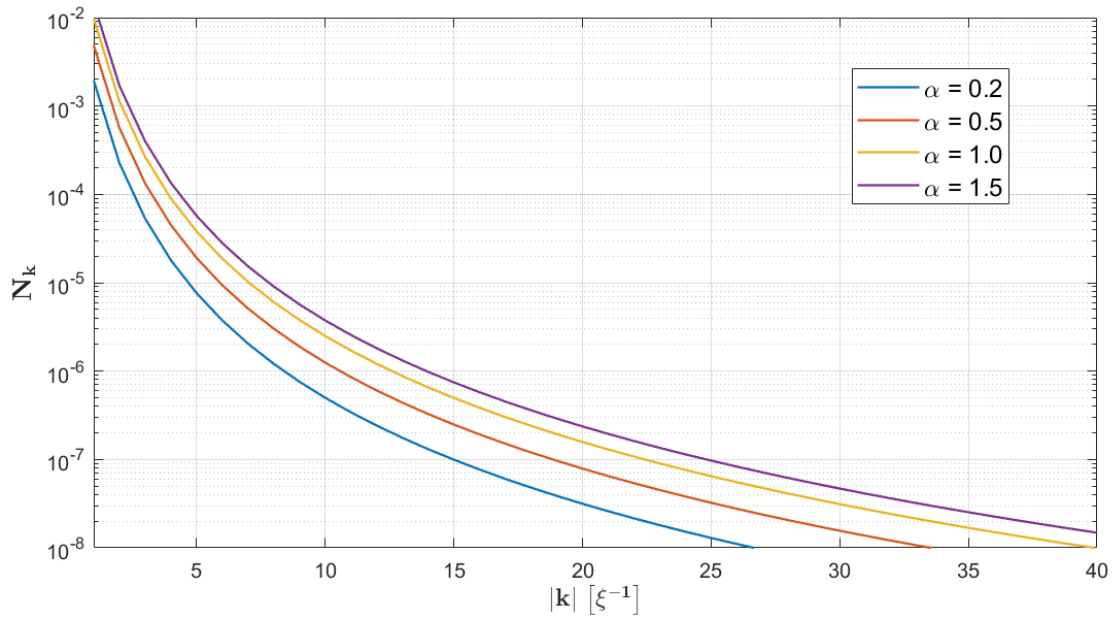
Met uitdrukking (3.4) voor de golffunctie en  $f(\mathbf{k})$  bepaald is het nuttig te kijken naar de wolk van fononen die de onzuiverheid omringt en bijdraagt tot de vorming van het polaron:

$$N_{\mathbf{k}} = \langle \varphi | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} | \varphi \rangle = |f(\mathbf{k})|^2. \quad (3.14)$$

Figuur 3.2 toont de bezettingsgraad van de verschillende excitatiemodes die geïnduceerd worden door een onzuiverheid in functie van de koppelingsconstante  $\alpha$  voor het geval  $m_B/m_I = 2.19$ .



Figuur 3.1: De energie van de grondtoestand  $E_G$  van de Hamiltoniaan uit (3.3) in functie van de koppelingsconstante  $\alpha$  voor drie verschillende massaverhoudingen  $m_B/m_I$ . Door  $E_{GBP}$  gelijk aan nul te stellen komt dit overeen met de polaron energie. De cut-off werd voor de berekening gekozen op  $\Lambda = 200\xi^{-1}$ .



Figuur 3.2: De bezetting van de verschillende excitatiemodes van de grondtoestand voor verschillende koppelingsconstanten  $\alpha$ . De parameters zijn  $m_B/m_I = 2.19$ ,  $\Lambda = 200\xi^{-1}$  en  $V \approx 250\xi^3$ .

## 4 | Non-equilibrium dynamica

Dynamica ver uit evenwicht en thermalisatie zijn populaire onderwerpen in theoretische, numerieke en experimentele studies van veeldeeltjessystemen. Vandaag de dag is de eigentoe-stand thermalisatie hypothese (ETH) algemeen aanvaard als verklaring voor thermalisatie van gesloten systemen en blijkt voor verschillende niet-integreerbare systemen inderdaad te gelden. Er zijn echter ook systemen waar de hypothese niet opgaat en bovendien zegt de ETH niets over de tijdschaal waarop thermalisatie zou plaatsvinden. Daarom bestuderen we in dit hoofdstuk de dynamica van een BEC uit evenwicht gebracht door een abrupte kwantum quench die een onzuiverheid introduceert. De dynamica wordt gevolgd a.d.h.v. het tijdsverloop van de laagste orde correlatiefuncties van Bogoliubov operatoren. Eerst bespreken we kort thermalisatie volgens de ETH.

### 4.1 Thermalisatie na kwantum quench

Algemeen beschouwt men de Hamiltoniaan van een veeldeeltjessysteem die afhangt van een bepaalde parameter  $g$  [19]. Voor  $t < 0$  is de parameter  $g = g_i$  en stelt men dat het systeem tijd genoeg heeft gehad om te relaxeren naar thermisch evenwicht. Voor de veeldeeltjesdichtheidsmatrix geldt dan

$$\hat{\rho} \sim \exp \left[ -\beta \hat{H}(g_i) \right], \quad (4.1)$$

met  $\beta = 1/k_B T$ . Meestal gaat men uit van de limiet  $T = 0$ , zodat thermisch evenwicht betekent dat het systeem zich in de grondtoestand  $|\Psi_0\rangle$  van de Hamiltoniaan  $\hat{H}_i = \hat{H}(g_i)$  bevindt. De dynamica van het systeem is triviaal. Op tijdstip  $t = 0$  vindt een quench plaats, i.e. de plotse verandering  $g_i \rightarrow g_f$ . Deze moet zich sneller voltrekken dan alle andere relevante tijdschalen, zodat het systeem zich niet langer in evenwicht bevindt t.o.v. de nieuwe Hamiltoniaan  $\hat{H}_f = \hat{H}(g_f)$ . De dynamica van het systeem voor  $t > 0$  wordt dan gedreven door deze nieuwe Hamiltoniaan  $\hat{H}_f$ . Het gevolg is een niet-triviale tijdsevolutie van de dichtheidsmatrix

$$\hat{\rho}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| \quad \text{waar} \quad |\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(g_f)t}|\Psi_0\rangle. \quad (4.2)$$

De initiële toestand kan geschreven worden in de basis van energie eigentoe-standen van de Hamiltoniaan na de quench:  $|\Psi_0\rangle = \sum_j c_j |\phi_j\rangle$ , met  $c_j = \langle\phi_j|\Psi_0\rangle$ . De evolutie van de golffunctie in de tijd wordt dan gegeven door

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j e^{-i\hat{H}_f t} c_j |\phi_j\rangle = \sum_j e^{-iE_j t} c_j |\phi_j\rangle, \quad (4.3)$$

met  $E_j$  de energie van de eigentoestand  $|\phi_j\rangle$ . De tijdsevolutie van de volledige veeldeeltjesgolffunctie bijhouden is te omslachtig. Het evalueren van de verwachtingswaarde van een observabelen  $\hat{A}$  op verschillende tijdstippen na de quench

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \text{Tr} \left[ \hat{\rho} \hat{A} \right] \quad (4.4)$$

is een handige manier om de dynamica van het systeem te volgen. Typisch is men dan op zoek naar de tijdschaal waarop de tijdsafhankelijkheid van de observabele wegvalt en de observabele dus convergeert naar een stationaire waarde. De vraag is of de dichtheidsmatrix dan opnieuw gelinkt kan worden aan een thermisch ensemble zoals in (4.1), wat zou inhouden dat het systeem een thermisch evenwicht heeft bereikt. Volgens de ETH moet een dergelijk stationair thermisch ensemble bereikt worden. De verwachtingswaarde van  $\langle \hat{A} \rangle$  na substitutie van de tijdsafhankelijke golffunctie (4.3) is

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \sum_{j,l} c_j^* c_l e^{i(\omega_j - \omega_l)t} \langle \phi_j | \hat{A} | \phi_l \rangle. \quad (4.5)$$

Ontaarde energieniveaus in het spectrum zijn uiterst uitzonderlijk voor interagerende veeldeeltjessystemen. Verwacht wordt dat het gemiddelde van de verwachtingswaarde voor lange tijden convergeert naar [19]

$$\overline{\langle \hat{A}(t) \rangle} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle \hat{A}(t) \rangle dt = \sum_j |c_j|^2 A_{j,j}, \quad (4.6)$$

met  $A_{i,j} = \langle \phi_i | \hat{A} | \phi_j \rangle$ . Als het systeem relaxeert, zal het naar deze waarde evolueren. Omdat deze observabele nu thermisch zou relaxeren, moet dit lange-tijd gemiddelde equivalent zijn aan de verwachting over het gepaste statistische ensemble. Het hierboven gevonden diagonaal ensemble en het microcanonische ensemble moeten met andere woorden hetzelfde resultaat voorspellen [18]:

$$\sum_j |c_j|^2 A_{j,j} = \langle A \rangle_{\text{micro}}(E_0) = \frac{1}{N_{E_0}} \sum_{|E_0 - E_j| < \Delta E} A_{j,j}, \quad (4.7)$$

waar  $E_0$  de energie is van de initiële toestand en  $\Delta E$  de halve breedte van een voldoende klein energie interval  $[E_0 - \Delta E, E_0 + \Delta E]$  waarbinnen  $N_{E_0}$  toestanden liggen. Dit kan losjes geïnterpreteerd worden als de manifestatie van ergodiciteit in kwantumsystemen. De ETH verklaart dit door aan te nemen dat de verwachtingswaarden  $A_{j,j}$  bijna constant zijn voor alle toestanden binnen het energie interval. Elke verwachtingswaarde voor een voldoende groot veeldeeltjessysteem komt overeen met het gemiddelde over het thermische ensemble:  $\langle \phi_j | \hat{A} | \phi_j \rangle = \langle A \rangle_{\text{micro}}(E_j)$ . Kwantumthermische toestanden zijn dus fundamenteel verschillend van klassieke thermische toestanden. Volgens de ETH is elke eigentoestand thermisch in de zin dat ze allemaal dezelfde verwachtingswaarde geven [18]. Initieel verbergt de coherentie tussen eigentoestanden dit, maar door defasering tijdens de tijdsevolutie komt dit naar boven. Voor enkele chaotische systemen werd thermalisatie reeds numeriek aangetoond [20, 37, 38]. Zoals reeds aangehaald in de inleiding wordt de hypothese algemeen verwacht op te gaan

voor integreerbare systemen. Een voorbeeld in de context van BEC's is de Hamiltoniaan voor een zuiver condensaat in de Bogoliubov benadering

$$\hat{H}_{BEC} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}}' \omega_k \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}. \quad (4.8)$$

In dergelijke modellen zijn te veel grootheden behouden, zodat de ergodische hypothese niet langer voldaan is. In  $\hat{H}_{BEC}$  zijn bijvoorbeeld naast de energie ook het aantal excitaties behouden, wat thermalisatie verhindert.

## 4.2 Hiërarchie van correlatiefuncties

Het tijdsverloop van een observabele  $\hat{A}$  onder invloed van een Hamiltoniaan  $\hat{H}$  kan bepaald worden via het Ehrenfest theorema:

$$i\partial_t \langle \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle. \quad (4.9)$$

De meest voor de hand liggende observabele om de vorming van het polaron te volgen, is de teloperator  $\hat{N}_{\mathbf{k}} = \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$  van Bogoliubov excitaties met momentum  $\mathbf{k}$ . We bestuderen de dynamica in het referentiestelsel van de onzuiverheid met het initiële impuls  $\mathbf{p}_I = 0$ , anders gezegd is de Hamiltoniaan opnieuw

$$\hat{H}_{LLP} = E_0 + \frac{1}{2m_I} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} + \sum_{\mathbf{k}}' \left[ \omega_k \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + U_k \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right]. \quad (4.10)$$

Verwacht wordt dat de extra termen ten opzicht van (4.8) de integreerbaarheid opheffen en de ETH opgaat voor dit systeem. De bewegingsvergelijking voor de verwachtingswaarde  $N_{\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  volgt uit (4.9) door simpelweg de commutatierelaties (2.25) toe te passen:

$$i\partial_t N_{\mathbf{k}} = U_k \left( \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle - \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \right). \quad (4.11)$$

Het tijdsverloop blijkt volledig af te hangen van de tijdsafhankelijkheid van  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  en  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle$ . Sterker nog, omdat  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle^*$  volstaat het om de dynamica van één van beiden te beschrijven. Dit geeft dan voor de tijdsafgeleide van  $N_{\mathbf{k}}$ :

$$\partial_t N_{\mathbf{k}} = -2U_k \times \text{Im} \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (4.12)$$

De tijdsafhankelijke verwachtingswaarde van de annihilatie operator  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  voldoet op zijn beurt aan

$$i\partial_t \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle = U_k + \left( \omega_k + \frac{k^2}{2m_I} \right) \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (4.13)$$

wat opnieuw bekomen wordt met behulp van (4.9). De twee differentiaalvergelijkingen (4.12) en (4.13) vormen geen gesloten stelsel en volstaan dus niet om op te lossen naar  $N_{\mathbf{k}}$ . De



tijdsafhankelijke derde orde correlatiefuncties dragen ook bij. Voor de eenvoud hernoemen we deze functies  $M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ . Het stelsel kan vervolgens uitgebreid worden met

$$\begin{aligned}
i\partial_t M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} &= \left\langle [\hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger, \hat{H}] \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger [\hat{\alpha}_{\mathbf{q}}, \hat{H}] \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} [\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{H}] \right\rangle \\
&= \left( \omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m_I} \right) M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} + U_k n_{\mathbf{q},\mathbf{q}} + U_q (n_{\mathbf{q},\mathbf{k}} - c_{\mathbf{q},\mathbf{k}}) + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \\
&= \left( \omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m_I} + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m_I} \right) M_{\mathbf{q},\mathbf{k}} + U_k n_{\mathbf{q},\mathbf{q}} + U_q (n_{\mathbf{q},\mathbf{k}} - c_{\mathbf{q},\mathbf{k}}) + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) F_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{s}}^5
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Om de vergelijkingen compact en overzichtelijk te houden is hier gekozen voor de verkorte notaties  $n_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ ,  $c_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  en  $F_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{s}}^5 = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ . In de laatste stap werd de vijfde orde correlator normaal geordend. Het wordt nu stilaan duidelijk dat in elke bewegingsvergelijking er nieuwe correlaties opduiken en ze groeien ook steeds in orde. Algemeen zal de eerste term in de Hamiltoniaan (4.10) ervoor zorgen dat de bewegingsvergelijking voor een correlator van orde  $N$  afhangt van correlatiefuncties van orde  $N + 2$ . Het stelsel van vergelijkingen zal in principe dus nooit sluiten. Om (4.12) exact op te lossen zou een oneindig aantal vergelijkingen nodig zijn voor systematisch groeiende correlatiefuncties. Uiteraard is dit een onmogelijke taak. In praktijk wordt typisch een benadering gemaakt door vanaf een bepaalde orde  $N$  de vergelijkingen af te breken. Dit houdt in de correlatiefuncties van orde  $N + 1$  en  $N + 2$  te benaderen, zodat het stelsel sluit. Een manier om dit te doen is bij wijze van een harde *cut-off*, waarbij de bijdragen van hogere orde correlatoren verwaarloosd worden. Anderzijds kunnen verwachtingswaarden geschreven worden als product van lagere orde correlaties. Sectie 4.3 bespreekt in meer detail de specifieke techniek die hiervoor wordt toegepast, namelijk de expansie in cumulanten. In dit werk zal om praktische redenen nooit met orden hoger dan  $N = 3$  gewerkt worden. We gaan ervan uit dat correlatoren van orde  $N = 4$  of  $N = 5$  voldoende klein zijn t.o.v. lagere orde, zodat deze ten allen tijde verwaarloosd kunnen worden of in gefactoriseerde vorm kunnen geschreven worden. Ter vervollediging, de bewegingsvergelijkingen van de kwadratische correlatiefuncties uit (4.14) zijn

$$i\partial_t c_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \left( \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}} + \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m_I} \right) c_{\mathbf{q},\mathbf{k}} + U_q \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + U_k \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} R_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{s}}^4; \tag{4.15}$$

$$i\partial_t n_{\mathbf{q},\mathbf{k}} = \left( \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} + \frac{k^2 - q^2}{2m_I} \right) n_{\mathbf{q},\mathbf{k}} + U_k \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle - U_q \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} K_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{s}}^4. \tag{4.16}$$

Deze zijn zoals verwacht gekoppeld aan correlatiefuncties van vierde orde in Bogoliubov operatoren,  $R_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{s}}^4 = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle$  en  $K_{\mathbf{q},\mathbf{k},\mathbf{s}}^4 = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ .

### 4.3 Cumulanten Expansie

Een waarschijnlijkheidsdichtheid  $p(x)$  van een stochastische variabele  $x$  wordt gekenmerkt door de momenten

$$\langle x^n \rangle \equiv \int p(x) x^n dx. \quad (4.17)$$

Deze momenten worden gegenereerd door een karakteristieke functie  $\tilde{p}(k)$  waarvoor geldt [39]

$$\tilde{p}(k) = \langle e^{-ikx} \rangle = \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ik)^n}{n!} x^n \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle. \quad (4.18)$$

Dit is simpelweg de Fourier transformatie van  $p(x)$ . Een alternatieve, vaak meer praktische manier om een distributie  $p(x)$  te typeren, is op basis van cumulanten  $\langle x^n \rangle_c$ . Ook hiervoor bestaat een genererende functie, meer bepaald het natuurlijk logaritme van  $\tilde{p}(k)$ :

$$\ln \tilde{p}(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle_c. \quad (4.19)$$

De n-de orde cumulant wordt gevonden door het nemen van de n-de afgeleide:

$$\langle x^n \rangle_c = i^n \frac{\partial^n}{\partial k^n} \ln \tilde{p}(k) \Big|_{k=0}. \quad (4.20)$$

Cumulanten zijn hiermee gelinkt aan de momenten. De eerste drie cumulanten, het gemiddelde, de variantie en de scheefheid van de verdeling, zijn dan [39]

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_c &= \langle x \rangle \\ \langle x^2 \rangle_c &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\ \langle x^3 \rangle_c &= \langle x^3 \rangle - 3\langle x^2 \rangle \langle x \rangle + 2\langle x \rangle^3. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Omgekeerd kan men de momenten schrijven in functie van de cumulanten:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \langle x \rangle_c \\ \langle x^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle_c + \langle x \rangle_c^2 \\ \langle x^3 \rangle &= \langle x^3 \rangle_c + 3\langle x^2 \rangle_c \langle x \rangle_c + \langle x \rangle_c^3. \end{aligned} \quad (4.22)$$

De cumulanten worden soms ook aangeduid als het *geconnecteerde* deel van het moment. Fricke paste dit principe toe op de verwachtingswaarden van producten van bosonische en fermionische creatie en annihilatie opeatoren [40]. Köhler en Burnett gebruikten dezelfde techniek om de dynamica van een zuiver gecondenseerd Bose gas te bestuderen [41]. Ook in recentere studies zien we dezelfde expansie terugkomen [20, 31]. Naar analogie met de expansie voor één stochastische variabele, geldt voor gezamenlijke cumulanten [40]

$$\begin{aligned} \langle B_1 \rangle &= \langle B_1 \rangle_c \\ \langle B_1 B_2 \rangle &= \langle B_1 B_2 \rangle_c + \langle B_1 \rangle \langle B_2 \rangle \\ \langle B_1 B_2 B_3 \rangle &= \langle B_1 B_2 B_3 \rangle_c + \langle B_1 \rangle \langle B_2 B_3 \rangle_c + \langle B_2 \rangle \langle B_1 B_3 \rangle_c \\ &\quad + \langle B_3 \rangle \langle B_1 B_2 \rangle_c + \langle B_1 \rangle \langle B_2 \rangle \langle B_3 \rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Hier stelt  $B_i$  bijvoorbeeld een bosonische veldoperator voor. Hogere orde correlaties worden recursief bepaald. Zo is voor  $N = 4$

$$\begin{aligned} \langle B_1 B_2 B_3 B_4 \rangle &= \langle B_1 B_2 B_3 B_4 \rangle_c + \sum_{\text{comb}} \langle B_1 \rangle \langle B_2 B_3 B_4 \rangle_c + \sum_{\text{comb}} \langle B_1 B_2 \rangle_c \langle B_3 B_4 \rangle_c \\ &+ \sum_{\text{comb}} \langle B_1 \rangle \langle B_2 \rangle \langle B_3 B_4 \rangle_c + \langle B_1 \rangle \langle B_2 \rangle \langle B_3 \rangle \langle B_4 \rangle, \end{aligned} \quad (4.24)$$

met  $\sum_{\text{comb}}$  de som over alle termen van dezelfde vorm met verschillende permutaties van de operatoren  $B_i$ . De eerste sommatie vat zo vier verschillende termen samen, de tweede drie verschillende termen en de laatste vat zes combinaties samen. Elke correlatiefunctie kan hiermee opgesplitst worden in een gefactoriseerd deel en een geconnecteerd niet-factoriseerbaar deel. Ook gezamenlijke cumulanten zijn gedefinieerd door een gelijkaardige genererende functie

$$\langle B_1 \dots B_n \rangle_c = \frac{\partial}{\partial x_1} \dots \frac{\partial}{\partial x_n} \ln \langle e^{x_1 B_1} \dots e^{x_n B_n} \rangle \Big|_{x_1=0; \dots; x_n=0}. \quad (4.25)$$

De cumulanten expansie geeft ons nu het nodige gereedschap om de oneindige hiërarchie van differentiaalvergelijkingen te sluiten bij orde  $N$  door de cumulanten van orde  $N + 1$  en  $N + 2$  te verwaarlozen. Het factoriseerbaar deel van de correlatiefuncties wordt wel nog in rekening genomen, zodat ze kunnen worden geschreven als som over lagere orde producten. Wat nu ook opvalt is dat de bewegingsvergelijkingen voor volledige correlatiefuncties eigenlijk meer informatie bevatten dan nodig is. De tijdsafgeleide van een kwadratische correlatiefunctie kan namelijk geschreven worden als

$$\partial_t \langle B_1 B_2 \rangle = \partial_t \langle B_1 B_2 \rangle_c + \langle B_1 \rangle \partial_t \langle B_2 \rangle + \langle B_2 \rangle \partial_t \langle B_1 \rangle \quad (4.26)$$

Als de tijdsafhankelijkheden van  $\langle B_1 \rangle$  en  $\langle B_2 \rangle$  gekend zijn, hoeft enkel nog de dynamica van het geconnecteerde deel  $\langle B_1 B_2 \rangle_c$  bepaald te worden. Dit principe kunnen we in onze hiërarchie ook toepassen en vereenvoudigt de uitdrukkingen aanzienlijk.

### 4.3.1 Mean-field benadering

Deze expansie in cumulanten toepassen voor correlatoren van orde  $N = 4$  en  $N = 5$  geeft zeer grote uitdrukkingen die de differentiaalvergelijkingen al snel onoverzichtelijk maken. Stap voor stap het systeem opbouwen door naar hogere orde uit te breiden, behoudt het overzicht en geeft een betere kijk op de bijdrage van elke orde tot de dynamica. De simpelste benadering van de hiërarchie verwaarloost alle cumulanten van orde  $N = 2$  en hoger. Met deze benadering is vgl.(4.13) te schrijven als

$$i\partial_t \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = U_{\mathbf{k}} + \left( \omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m_I} \right) \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (4.27)$$

Dit kan nog verder vereenvoudigd worden door de som uit te werken. In de thermodynamische limiet is deze namelijk te schrijven als een integraal:

$$\sum_{\mathbf{s} \neq 0} \rightarrow V \int \frac{d\mathbf{s}}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^{s_{\max}} s^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi ds. \quad (4.28)$$

De discrete momenta zijn vervangen door een continue variabele. Hiermee ligt het volume van het systeem ook vast op  $V = L^3 = (2\pi/ds)^3$ . Toegepast op de sommatie uit de bewegingsvergelijking geeft dit

$$\sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^2} k \int_0^\pi \int_0^{s_{max}} \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle s^3 \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta ds, \quad (4.29)$$

waarbij  $\mathbf{k}$  langs de z-as is gekozen zodanig dat  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{s} = |\mathbf{k}||\mathbf{s}| \cos(\theta)$ . Opmerkelijk is nu dat het gedrag van  $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle$  enkel afhangt van de grootte  $|\mathbf{k}|$  met als gevolg dat de volledige integraal gelijk is aan nul. Dankzij de sferische symmetrie is de integraal over  $\theta$  immers

$$\int_0^\pi \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta = 0. \quad (4.30)$$

Hiermee valt de koppeling tussen verschillende k-modes in vgl.(4.27) weg. Deze eerste benadering is in principe niets anders dan een tijdsafhankelijke mean-field (MF) benadering. De overblijvende bewegingsvergelijking vormt dan op zich een gesloten stelsel van twee eerste orde lineaire differentiaal vergelijkingen, dat analytisch oplosbaar is:

$$\begin{cases} \partial_t \text{Re}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle &= \Omega_k \text{Im}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \\ \partial_t \text{Im}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle &= -U_k - \Omega_k \text{Re}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle, \end{cases} \quad (4.31)$$

met  $\Omega_k = \omega_k + \frac{k^2}{2m_I}$ . De grondtoestand voor de quench is het vacuüm van fononen, wat correspondeert met een beginvoorwaarde  $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}(0) \rangle = 0$ . De oplossingen van het stelsel zijn dan

$$\text{Re}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \frac{U_k}{\Omega_k} [\cos(\Omega_k t) - 1]; \quad \text{Im}\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}(t) \rangle = -\frac{U_k}{\Omega_k} \sin(\Omega_k t). \quad (4.32)$$

Het resultaat substitueren in vgl.(4.12) geeft de oplossing voor  $N_{\mathbf{k}}$ :

$$N_{\mathbf{k}}(t) = \frac{2U_k^2}{\Omega_k^2} [1 - \cos(\Omega_k t)]. \quad (4.33)$$

Hier werd meteen de beginvoorwaarde  $N_{\mathbf{k}}(0) = 0$  toegepast. Onze tijdsafhankelijke MF benadering resulteert simpelweg in een oscillatie rond een gemiddelde bezetting die twee maal zo groot is als die bij evenwicht (3.14). Het systeem evolueert unitair dus hoeft het niet te relaxeren naar de grondtoestand. In recent onderzoek naar de vorming van het bose polaron maakt men gebruik van een tijdsafhankelijke versie van de variationele golffunctie uit de LLP aanpak [22, 23]. Deze coherente toestand is dan van de vorm

$$|\varphi(t)\rangle = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{k}}' [\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger f_{\mathbf{k}}(t) - \hat{a}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^*(t)] \right\} |0\rangle, \quad (4.34)$$

waar de variationele functionaal  $f_{\mathbf{k}}(t)$  nu ook afhangt van de tijd. Deze wordt typisch bepaald via de Euler-Lagrange vergelijking waarbij  $\mathcal{L} = \langle \varphi(t) | i\partial_t - \hat{H}_{LLP} | \varphi(t) \rangle$ . Substitutie van de Hamiltoniaan (4.10) geeft dan een differentiaalvergelijking voor de functionaal:

$$i\dot{f}_{\mathbf{k}}(t) = \left( \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{k}}' \mathbf{k} |f_{\mathbf{k}}(t)|^2 + \Omega_k \right) f_{\mathbf{k}}(t) + U_k \quad (4.35)$$

Vanwege de sferische symmetrie van het systeem reduceert deze vergelijking tot

$$i\dot{f}_{\mathbf{k}}(t) = \Omega_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}}(t) + U_{\mathbf{k}}, \quad (4.36)$$

wat dan weer analytisch oplosbaar is naar  $f_{\mathbf{k}}(t)$ . De verwachtingswaarde van de teloperator in deze toestand,  $N_{\mathbf{k}}(t) = |f_{\mathbf{k}}(t)|^2$  is exact hetzelfde als het resultaat uit (4.33). De MF benadering hier toegepast is equivalent aan het veronderstellen van een coherente toestand  $|\varphi(t)\rangle$ . De dynamica die wordt waargenomen zal tot op zeker hoogte aanvaardbaar zijn op korte tijden na de quench. Figuur 4.1 toont de evolutie van de bezettingsgraad van enkele  $\mathbf{k}$ -modes op een kleine tijdschaal. Hier werd uitgegaan van een  $^{40}\text{K}$ -onzuiverheid in een BEC van  $^{87}\text{Rb}$ -atomen naar analogie met het experiment van Hu et al.(2016)<sup>1</sup>, specifiek met een repulsieve boson-onzuiverheid interactie. De s-golf verstrooiingslengte  $a_{IB}$  wordt zodanig gekozen dat  $\alpha = 0.5$ . Zoals verwacht zijn het voornamelijk de lage  $\mathbf{k}$ -modes die worden geëxciteerd door de onzuiverheid. Deze resultaten zeggen echter nog niet veel over de evolutie naar een stabiele polarontoestand. We weten hiermee hoe de omgeving rond de onzuiverheid reageert op de plotse quench. Een andere kijk op de dynamica wordt gegeven in de inset van figuur 4.1 a.d.h.v. het totaal aantal fononen dat door de interactie met de onzuiverheid geïnduceerd wordt na de quench:

$$N_{tot}(t) = \sum'_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} N_{\mathbf{k}} \quad (4.37)$$

Deze parameter wordt voor langere evolutietijden weergegeven om aan te tonen dat het systeem zelfs in deze simpele MF benadering toch lijkt te evolueren naar een globaal evenwicht. Dit was niet rechtstreeks af te leiden uit de oscillatie van de verschillende modes.

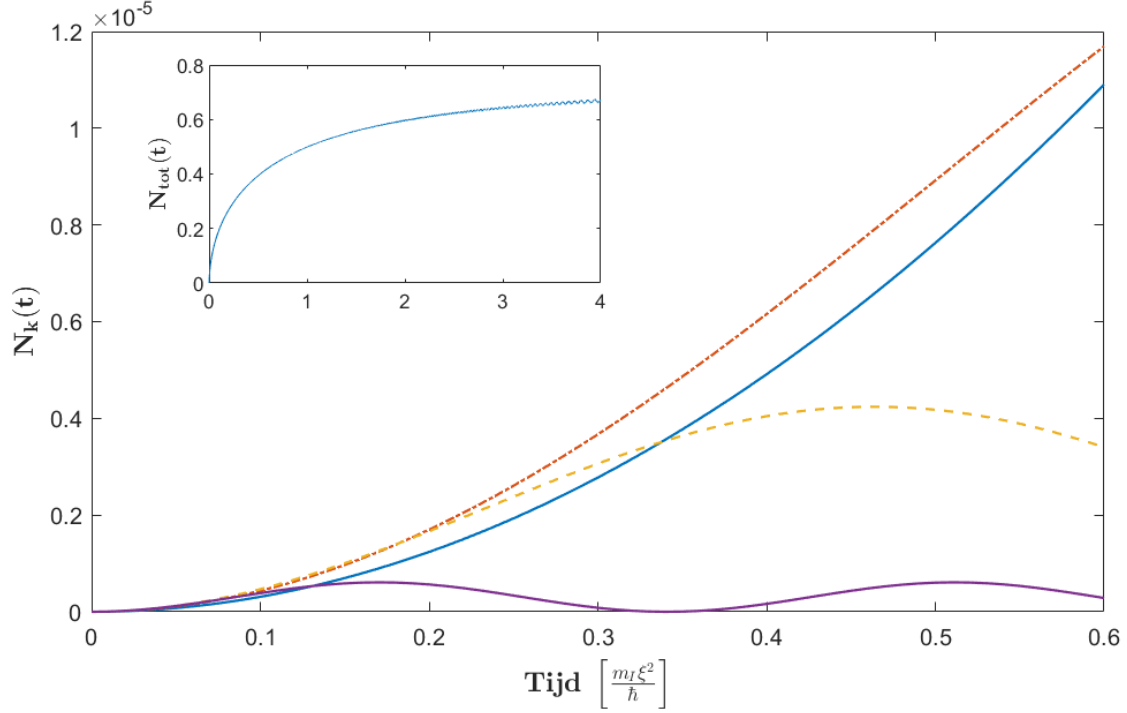
De grafieken geven al een mooi beeld van de invloed van de onzuiverheid, maar verwacht wordt dat de koppeling tussen de verschillende excitatiemodes toeneemt naarmate het systeem verder evolueert na de quench. Op korte tijden zijn er weinig fononen en de polaronische effecten dus klein. In de figuur is echter te zien dat het aantal fononen nog verder zal toenemen. De aanname van een coherente toestand volstaat niet om deze polaronische effecten te beschrijven. Studies die ook correlatiefuncties tussen de fononen beschrijven blijken de polaronenergie beter te benaderen [42,43]. Als we het systeem op langere tijden na de quench willen volgen, moeten deze dus ook in onze analyse mee in rekening worden genomen.

### 4.3.2 Gaussische benadering

Een betere benadering van het systeem wordt nu toegepast door de kwadratische correlaties niet langer te verwaarlozen. De termen met sommaties over  $\mathbf{k}$  in vergelijkingen (4.39), (4.42) en (4.43) induceren dan verstrengeling tussen de excitatiemodes. Met de techniek van expansie in cumulanten is het mogelijk het systeem van vergelijkingen te sluiten bij  $N = 2$ . We stellen dat de cumulanten van orde  $N = 3$  en  $N = 4$  nog steeds verwaarloosbaar klein zijn t.o.v. de andere bijdragen. De verwachtingswaarden worden met andere woorden genomen

---

<sup>1</sup>De eenheden waarin alles wordt uitgedrukt zijn weergegeven in tabel 2.1.



Figuur 4.1: Het tijdsverloop van de bezetting van enkele excitatie modes met golfgetallen  $|k| = 1\xi^{-1}$ (blauw),  $|k| = 2\xi^{-1}$  (oranje),  $|k| = 3\xi^{-1}$ (geel),  $|k| = 5\xi^{-1}$ (paars). Dit is voor een systeem met  $m_B/m_I = 2.19$  en  $\alpha = 0.5$ . Inset: Het totaal aantal fononen  $N_{tot}$  in functie van de tijd.

over een Gaussische verdeling. Vergelijking (4.13) wordt zo

$$i\partial_t \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = U_{\mathbf{k}} + \left( \omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m_I} \right) \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \left[ \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \right]. \quad (4.38)$$

Ook nu gaan we uit van de thermodynamische limiet. Puur notatieel behouden we in de formules wel het sommatiesymbool. Het argument dat ook in vgl.(4.29) werd toegepast kan hier opnieuw gebruikt worden. Als het product van correlatiefuncties in het integrandum sferisch symmetrisch is, dan is de integraal gelijk aan nul. Dit is bijvoorbeeld het geval voor de laatste twee termen uit (4.38) zodat de bewegingsvergelijking kan geschreven worden als

$$i\partial_t \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = U_{\mathbf{k}} + \left( \omega_{\mathbf{k}} + \frac{k^2}{2m_I} \right) \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \left[ \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c \right]. \quad (4.39)$$

De tijdsafhankelijkheid is gekoppeld aan het niet-factoriseerbaar deel van de kwadratische correlatiefuncties. Wat is hun evolutie in de tijd? Met de gelijkheden uit (4.23) en de eerder

bepaalde tijdsafgeleiden (4.13) en (4.16) volgt:

$$\begin{aligned}
i\partial_t \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c &= i\partial_t c_{\mathbf{q},\mathbf{k}} - [i\partial_t \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle] \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle - [i\partial_t \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle] \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle \\
&= \left[ \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}} + \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m_I} \right] \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m_I} \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \\
&\quad + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' \left[ (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} R_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{s}}^4 - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle M_{\mathbf{s},\mathbf{k}} - (\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle M_{\mathbf{s},\mathbf{q}} \right]
\end{aligned} \tag{4.40}$$

De expansie in cumulanten is hier nog niet toegepast op de derde en vierde orde correlaties. Deze toepassing wel hanteren, geeft een lange onoverzichtelijke uitdrukking voor de termen binnen de sommatie. Verwaarlozen we ineens de cumulanten van orde  $N = 3$  en  $N = 4$ , dan vallen een heleboel termen al weg. Wordt dan nog rekening gehouden met het argument van de sferische symmetrie binnen de sommatie, kan de laatste term uit de bewegingsvergelijking gerschreven worden als

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{s}}' &\left[ (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} \left( n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c c_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c + n_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c \right) + (\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) \left( \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c \right) \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \left( \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle c_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle n_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Dit is duidelijk symmetrisch onder uitwisseling van de momenta  $\mathbf{k}$  en  $\mathbf{q}$ . Dit beperkt handig de combinaties die we moeten berekenen. Uiteindelijk krijgen we dan voor de cumulant van de anomale correlatiefunctie

$$\begin{aligned}
i\partial_t c_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c &= \left[ \omega_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{q}} + \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m_I} \right] c_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m_I} \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \\
&\quad + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' \left( \mathbf{k} \cdot \mathbf{s} \left( [n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle] c_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c + [c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle] n_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c \right) \right. \\
&\quad \left. + \{\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{q}\} \right)
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Op gelijkaardige wijze bekomt men de bewegingsvergelijking voor de complementaire tweede orde cumulant:

$$\begin{aligned}
i\partial_t n_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c &= \left( \omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{q}} + \frac{k^2 - q^2}{2m_I} \right) n_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' \left( \mathbf{k} \cdot \mathbf{s} \left( [\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c] (n_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c)^* \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + [\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c] (c_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c)^* \right) + \{\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{q}\}^* \right)
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Hier werd gebruik gemaakt van het feit dat  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle_c = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle_c^* = (n_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c)^*$  en  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \rangle_c = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \rangle_c^* = (c_{\mathbf{s},\mathbf{q}}^c)^*$ . Deze gelijkheden volgen simpelweg uit de analogie van de bewegingsvergelijkingen met dezelfde beginvoorwaarden. De set van vergelijkingen (4.38), (4.42) en (4.43) is nu gesloten, maar dit is technisch gezien nog steeds een oneindige set. Zo heeft elke cumulant  $n_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c$  voor welbepaalde golfgetallen  $\mathbf{k}$  en  $\mathbf{q}$  zijn eigen vergelijking die dan ook nog eens gelinkt is aan de volledige momentumruimte via de sommatie over  $\mathbf{s}$ . Het is onmogelijk om dit gesloten systeem van gewone differentiaalvergelijkingen analytisch oplossen. In het volgende hoofdstuk ligt de focus daarom op een numerieke aanpak van het probleem.

## 5 | Numerieke analyse

Het stelsel van differentiaalvergelijkingen (4.39),(4.42) en (4.43) kan niet langer analytisch behandeld worden, maar is wel numeriek oplosbaar. De opgave is een typisch beginvoorwaardenprobleem. De variabelen van het stelsel zijn de eerste en tweede orde cumulanten die allen nul zijn op tijdstip  $t = 0$ . Dit volgt uit de begintoestand van het systeem, meer bepaald het vacuüm van Bogoliubov excitaties. In de literatuur staan verschillende technieken beschreven om dergelijke beginvoorwaardenproblemen op te lossen [44]. De meesten baseren zich op hetzelfde principe, namelijk het vervangen van differentialen door eindige veranderingen, bijvoorbeeld  $dt \rightarrow \Delta t$ . Dit resulteert in algebraïsche vergelijkingen voor de verandering van functies wanneer de onafhankelijke variabele  $t$  toeneemt met  $\Delta t$ . Voor een voldoende kleine tijdstap geeft dit een goede benadering van de evolutie van de functie. Niet wetend hoe de cumulanten zich zullen gedragen, lijkt de beste keuze voor een numerieke oplossingsmethode een vierde orde Runge-Kutta (RK4) methode. Voor wetenschappelijke doeleinden worden de Runge-Kutta methodes regelmatig gebruikt [23, 31]. Een hogere orde zou ook mogelijk zijn, maar hier is de afweging gemaakt tussen aantal evaluaties van de functies die het algoritme vereist (i.e. de orde) en de accuraatheid ervan. Expliciet ziet de oplossingsmethode er als volgt uit: gegeven een differentiaalvergelijking van de eerste orde

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)) \quad (5.1)$$

met beginvoorwaarde  $y(t_0) = y_0$  en  $t \in [t_0, t_e]$ , dan wordt de functie  $y(t)$  op het  $i + 1$ -de tijdstip uit een discrete reeks  $t_i = t_0 + i \cdot \Delta t$  gegeven door [45]

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (5.2)$$

waarbij

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, y_i) \\ k_2 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_1\right) \\ k_3 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_2\right) \\ k_4 &= f(t_i + h, y_i + hk_3) \end{aligned} \quad (5.3)$$

Deze techniek is equivalent aan een vierde orde Taylor-expansie van  $y(t)$ . De lokale discretisatie fout is zodoende van de orde  $O(\Delta t^5)$ . Een voordeel van de RK4-methode is dat er



geen evaluaties van afgeleiden nodig zijn. Anderzijds vereist de aanpak wel vier evaluaties van  $f(t, y(t))$  per tijdstap. Een nadeel van deze RK4-methode, in tegenstelling tot andere methodieken zoals de Adams multistep methoden, is dat enkel informatie uit de vorige tijdstap gebruikt wordt [45].

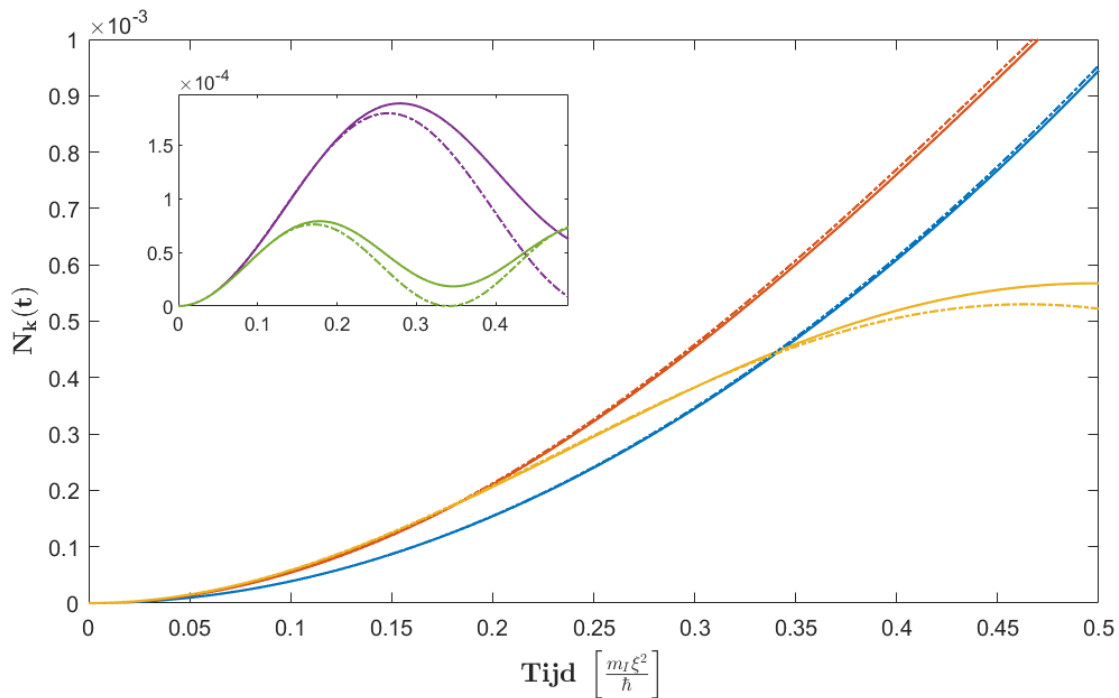
Appendix B geeft een overzicht van de code die in MATLAB geschreven werd en die de RK4-methode implementeert. Naast het discretiseren van de tijd moeten ook de momenta gediscrètiseerd worden. In B.1 is te zien hoe dit wordt aangepakt. De variabelen  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  worden samengenomen in een eindige 1D array die de radiale component van  $\mathbf{k}$  voorstelt. De verwachtingswaarden  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  en  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  worden voorgesteld door 3D matrices, omdat naast de groottes  $|\mathbf{k}|$  en  $|\mathbf{q}|$  ook de hoek  $\theta$  tussen de twee vectoren bepalend is. De convergentie van de oplossingen hangt enerzijds af van hoe de momentumruimte wordt gesampled en anderzijds van de grootte van de tijdstap  $\Delta t$ . Beide discretisaties worden wel beperkt door de hoeveelheid computationeel rekenwerk nodig om een simulatie te runnen.

## 5.1 $^{40}\text{K}$ onzuiverheid

Het systeem dat we benaderen is opnieuw dat van een fermionisch kaliumatoom als onzuiverheid in een BEC van rubidiumatomen. De momentumruimte wordt hier gesampled door een discrete, uniforme set van 50 waarden voor  $|\mathbf{k}|$ . De cut-off van momenta is  $\Lambda = 50\xi^{-1}$  en het volume  $V \approx 250\xi^3$ . Laat ons eerst kijken hoe het systeem zich op korte tijden gedraagt en dan vooral in verhouding met de vorige benadering. Figuur 5.1 toont de bezetting van enkele  $k$ -modes op korte tijden in de Gaussische benadering en vergelijkt deze met de complementaire analytische oplossingen in de MF benadering. Voor korte tijden lijken de twee aanpakken nog redelijk op elkaar aan te sluiten. Voor de allerlaagste energiemodes, die ook de grootste bezettingen kennen, is op deze tijdschaal nog geen significant verschil te zien. Modes met grotere golfgetallen wijken na een bepaalde tijd af van hun MF resultaat, zoals ook te zien is in de inset van de figuur. Hoe hoger de energie van de mode, hoe sneller dit gebeurt, maar het verschil tussen de twee benaderingen neemt ook af met stijgende  $|\mathbf{k}|$ . Het verschil tussen de MF aanpak en onze numerieke oplossing uit zich op kleine tijdschaal dus voornamelijk in de hogere energiemodes en is nog redelijk beperkt op korte tijden. Figuur 5.2 geeft opnieuw de bezetting weer van enkele modes, maar nu voor langere evolutietijden. Hier is duidelijk te zien dat de kwadratische correlatiefuncties voornamelijk een demping van de amplitude van de oscillaties introduceren. Iedere mode vertoont een gelijkaardig gedrag weliswaar op een andere schaal. De bezetting is nog steeds het grootste voor de excitaties met laagste energie. De stippenlijnen in de figuur geven de gemiddelde bezetting aan waarrond de overeenkomstige modes in de MF benadering oscilleren. De gemiddelde bezetting van elke mode is hoger dan voorheen, wat ook een indicatie is voor een groter totaal aantal fononen dat door de onzuiverheid wordt geïnduceerd. Om dit nog beter te illustreren wordt in figuur 5.3 de tijdsevolutie  $N_{tot}(t)$  vergeleken voor beide benaderingen, opnieuw door te sommeren over alle golfgetallen:

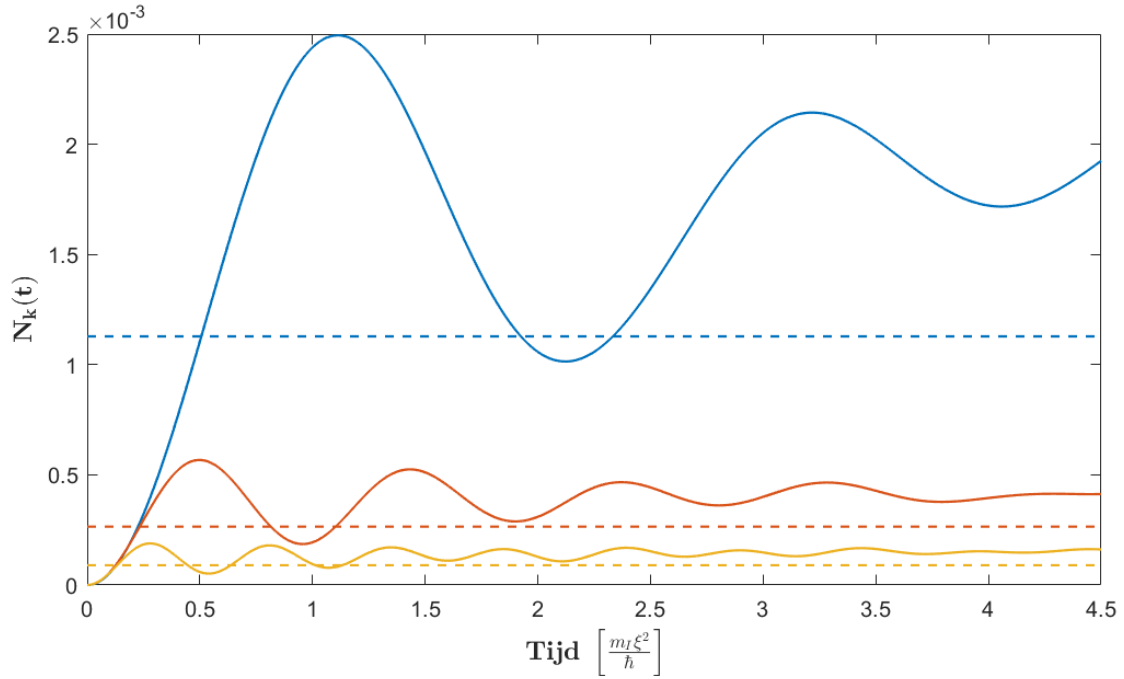
$$N_{tot}(t) = \sum_{\mathbf{k}}' N_{\mathbf{k}}(t) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} N_{\mathbf{k}}(t). \quad (5.4)$$

Uit deze vergelijking blijkt dat in het systeem inderdaad meer fononen worden geïnduceerd dan oorspronkelijk aangenomen in de MF benadering. Een tekortkoming die hier wordt blootgelegd, is het beperkt aantal  $\mathbf{k}$ -waarden in de discretisatie. De integraal uit (5.4) die numeriek wordt opgelost, vereist een fijne discretisatie opdat convergentie zou optreden. In onze uitvoering blijkt het grid hier niet aan te voldoen. Voor het MF resultaat konden meer gridpunten genomen worden, wat zich uit in een gladdere curve in figuur 5.3. De discretisatie kon in de numerieke analyse niet verder verfijnd worden vanwege limitaties op de beschikbare rekenkracht. De onzekerheid op het resultaat  $N_{tot}(t)$  voor  $t > 0.5 m_I \xi^2 / \hbar$  is daardoor zeer groot. Het toont echter wel aan dat de huidige werkwijze, mits een beter grid, een correctie zou kunnen geven op het totaal aantal fononen dat het polaron aankeed.

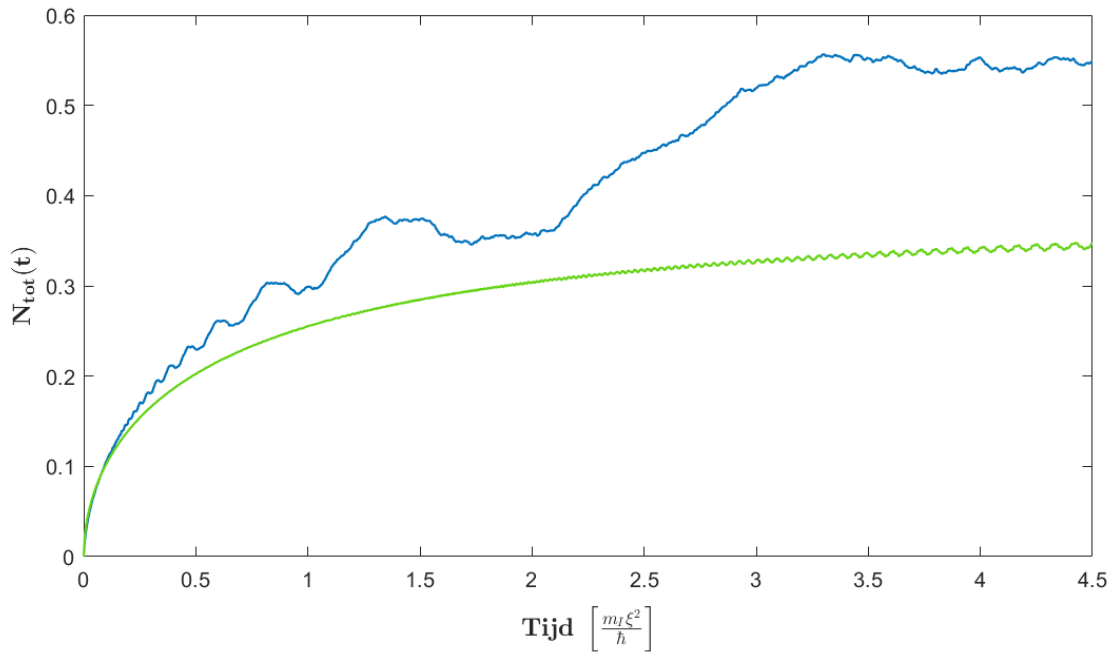


Figuur 5.1: De tijdsevolutie van de bezettingsgraad van drie verschillende excitatiemodes in de Gaussische benadering (volle lijnen) en de MF benadering (streep-puntlijnen). De golfgetallen voor de modes zijn  $|\mathbf{k}| = 1\xi^{-1}$  (blauw),  $|\mathbf{k}| = 2\xi^{-1}$  (oranje) en  $|\mathbf{k}| = 3\xi^{-1}$  (geel). Inset: Nog twee excitatiemodes met golfgetallen  $|\mathbf{k}| = 4\xi^{-1}$  (paars),  $|\mathbf{k}| = 5\xi^{-1}$  (groen) worden getoond.

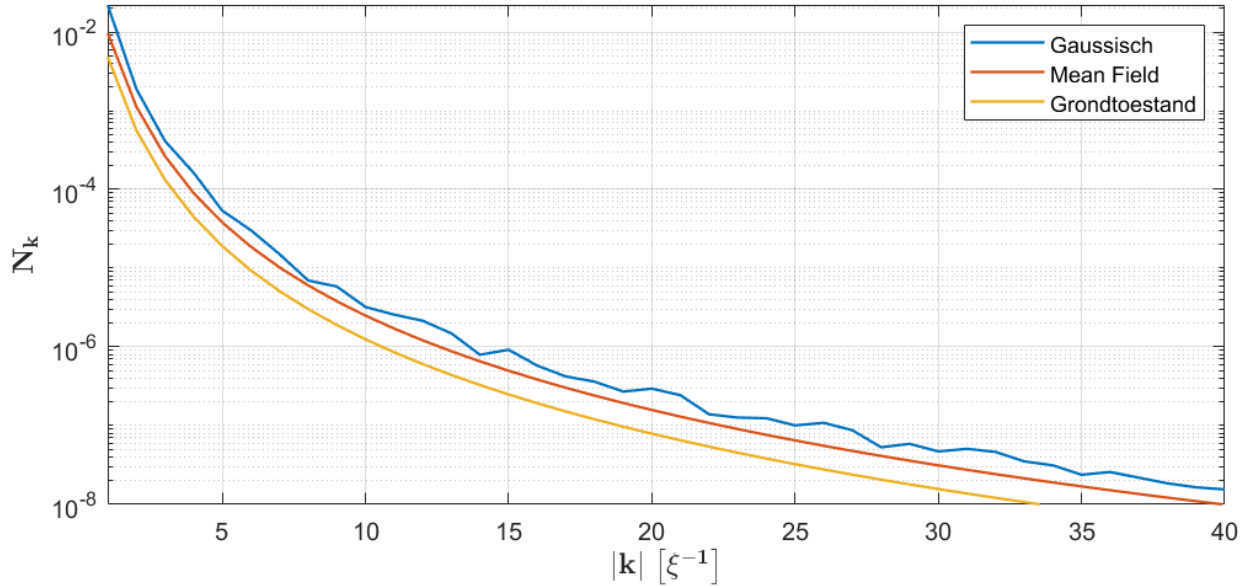
Een kwalitatieve vergelijking van de eindtoestand wordt gegeven in figuur 5.4. De momentumverdeling van de bezetting  $N_{\mathbf{k}}$  op het einde van onze tijdsevolutie  $t = 4.45 m_I \xi^2 / \hbar$  wordt hier vergeleken met de bezetting van de grondtoestand uit hoofdstuk 3 en de gemiddelde bezetting van de analytische MF oplossing.



Figuur 5.2: Het tijdsverloop van de bezetting van de excitatie modes met golfgetallen  $|k| = 2\xi^{-1}$  (blauw),  $|k| = 3\xi^{-1}$  (oranje),  $|k| = 4\xi^{-1}$  (geel). Dit is voor een systeem met  $m_B/m_I = 2.19$  en  $\alpha = 0.5$  in een volume  $V \approx 250\xi^3$ . De stippenlijnen tonen de gemiddelde bezetting van het MF resultaat.



Figuur 5.3: De tijdsevolutie van het totaal aantal excitaties in het BEC in de MF benadering (groen) en de Gaussische aanpak (blauw).



Figuur 5.4: De bezetting van de excitatiemodes op tijdstip  $t = 4.45 m_I \xi^2 / \hbar$  samen met de bezetting voor de grondtoestand en de gemiddelde bezetting van het MF resultaat.

## 5.2 Dichtheidsprofielen

In de vorige sectie lag de focus op het in beeld brengen van de dynamica in de momentumruimte. De evolutie kan ook in de reële ruimte getoond worden. Huidige technologieën zijn immers in staat om dichtheidsprofielen van BEC's rechtstreeks te meten en dit zou in toekomstige experimenten ook kunnen toegepast worden in het kader van het Bose polaron. De dichtheid aan thermische bosonen die het polaron omgeven  $\hat{\rho}_B(\mathbf{r})$ , kan uitgedrukt worden als Fourier getransformeerde van de dichtheid in de momentumruimte

$$\hat{\rho}_B(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \hat{\rho}_B(\mathbf{q}). \quad (5.5)$$

Deze dichtheid  $\rho_B(\mathbf{q})$  kan op zijn beurt geschreven worden in functie van de Bogoliubov operatoren  $\hat{a}_{\mathbf{k}}$  en  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ :

$$\hat{\rho}_B(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}}' \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}}' \left( u_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger + v_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} \hat{a}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \right) \left( u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right). \quad (5.6)$$

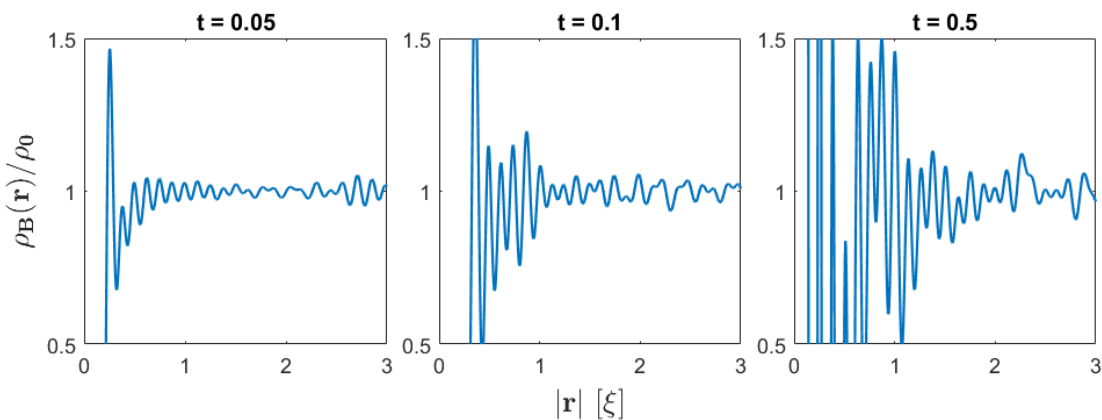
Als hier de verwachtingswaarde wordt genomen, is dit uit te drukken in functie van de eerste en tweede orde cumulanten. Dit wordt namelijk

$$\begin{aligned} \rho_B(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}}' \left[ v_{\mathbf{k}}^2 \delta(\mathbf{q}) + (u_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} v_{\mathbf{k}} + v_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}}) \left( \langle \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \right) \right. \\ \left. + u_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} v_{\mathbf{k}} \left( \langle \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \hat{a}_{-\mathbf{k}} \rangle_c^* + \langle \hat{a}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rangle^* \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle^* \right) + v_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} u_{\mathbf{k}} \left( \langle \hat{a}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_c + \langle \hat{a}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (5.7)$$

waar  $u_k$  en  $v_k$  de Bogoliubov coëfficiënten zijn. Tot slot kan dankzij de sferische symmetrie van  $\rho_B(\mathbf{q})$  de Fourier transformatie in (5.5) als volgt uitgewerkt worden:

$$\rho_B(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\Lambda q \rho_B(q) \sin(qr) dq \quad (5.8)$$

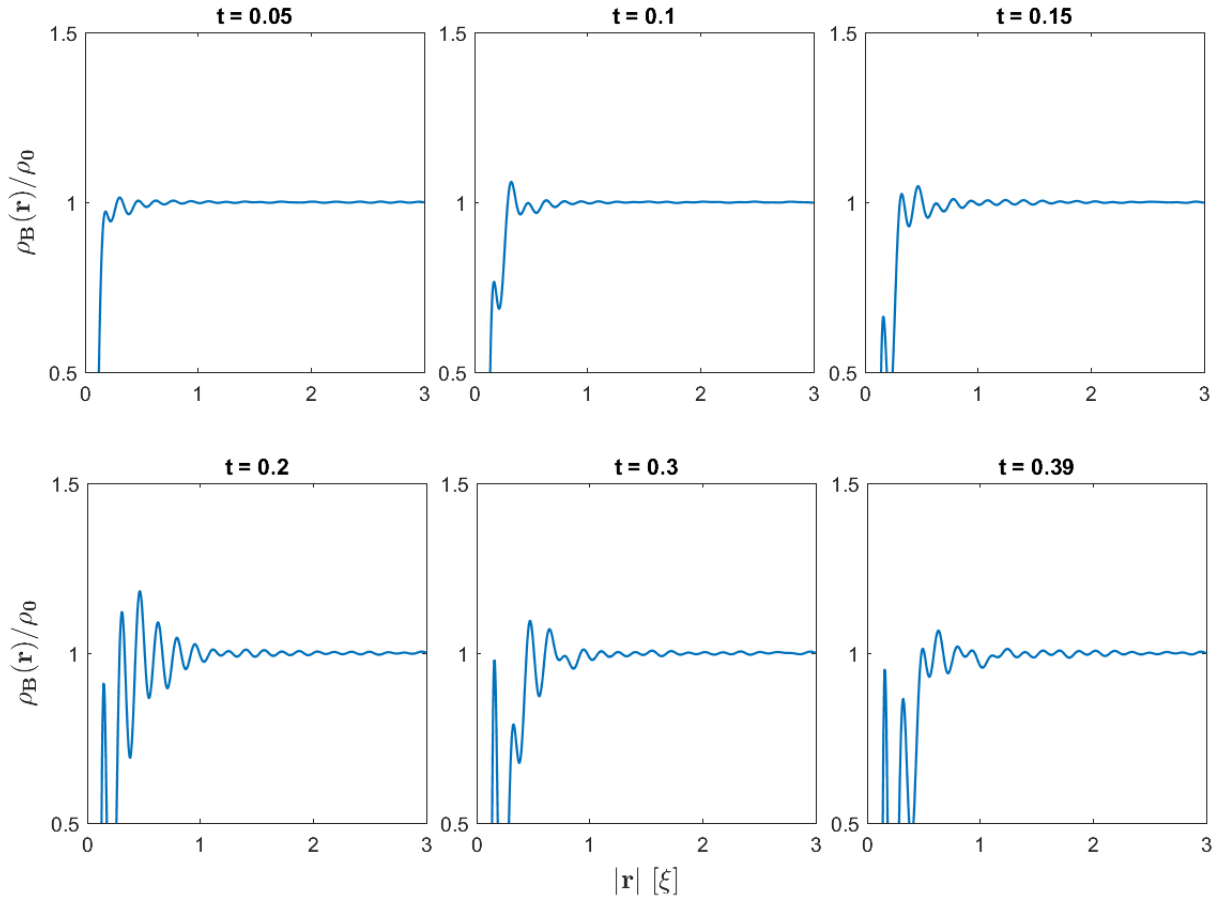
De integralen worden ook hier numeriek bepaald. Figuur 5.5 toont de relatieve dichtheid van thermische bosonen  $\rho_B(\mathbf{r})/\rho_0$  voor hetzelfde systeem dat in de vorige sectie werd geanalyseerd. Hier is  $\rho_0$  de dichtheid op tijdstip  $t = 0$ , dus voor een vacuum van excitaties. In de figuur zien we opnieuw hetzelfde probleem als in figuur 5.3 naar boven komen, namelijk de onderbemonstering van de  $k$ -ruimte. Er zijn niet genoeg gridpunten om de resultaten voor de integralen te doen convergeren.



Figuur 5.5: De relatieve dichtheid van thermische bosonen i.f.v. de afstand tot de onzuiverheid is weergegeven voor verschillende tijden na de quench. Dit is voor een systeem waar  $m_B/m_I = 2.19$ ,  $\alpha = 0.5$  en  $V \approx 250\xi^3$ , en een uniforme discretisatie van de  $k$ -ruimte met 50 gridpunten en cut-off  $\Lambda = 50\xi^{-1}$ .

Om toch een beeld te geven van de evolutie van de dichtheid bekijken we kort een systeem met een fijner grid. De cut-off is nu  $\Lambda = 40\xi^{-1}$  en het aantal gridpunten wordt opgevoerd van 50 naar 70. Bijgevolg vergroot ook het volume van het systeem tot  $V = 1330\xi^3$ . We verwachten dat een groter volume geen invloed zal hebben op de fysica die zich afspeelt op de relevante tijdschaal. De koppelingsconstante en massa blijven hetzelfde. Een nadeel is wel dat een fijner grid de rekentijd drastisch verhoogt en dus de tijd waarover kan worden geëvolueerd beperkt. Figuur 5.6 toont enkele dichtheidsprofielen op verschillende tijdstippen na de quench voor dit nieuwe systeem. Op kortere tijden lijkt de ruis die in de vorige figuur duidelijk aanwezig was sterk afgenomen te zijn. Deze neemt echter toe naarmate het de tijd verder evolueert. Het grid nog verfijnen, wat praktisch niet mogelijk was binnen het tijdsframe van de thesis, zal hoogstwaarschijnlijk dit resultaat nog verbeteren. Toch kunnen we al enkele zaken opmerken in de grafieken hieronder. Zo zien we dat de dichtheid sterk afneemt in de limiet  $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$ . Een verklaring hiervoor is de repulsieve interactie tussen de bosonen en de onzuiverheid ( $a_{IB} > 0$ ). De bosonen in de directe omgeving van de onzuiverheid worden weggeduwd. Hierrond lijkt zich een relatief dunne shil van hogere dichtheid te

vormen. De invloed van de onzuiverheid reikt verder naarmate de tijd vordert. Helaas zijn de evolutietijden hier te kort om iets te zeggen over het evenwicht dat gevormd zou worden. De piek in de dichtheid lijkt ook hoger en breder te worden op langere tijden, maar het is moeilijk om hier iets concreet over te zeggen. De resultaten tonen wel potentiëel om ook in de reële ruimte uitspraken te doen over de vorming van het polaron, maar daarvoor zullen een fijner grid en langere evolutietijden nodig zijn.



Figuur 5.6: De relatieve dichtheid van thermische bosonen in de reële ruimte wordt weergegeven voor verschillende tijden na de quench. Dit is voor een systeem waar  $m_B/m_I = 2.19$ ,  $\alpha = 0.5$  en  $V \approx 1330\xi^3$ , en een discretisatie van de k-ruimte met 70 gridpunten en cut-off  $\Lambda = 40\xi^{-1}$ .

## 6 | Discussie

### 6.1 Vergelijking met het experiment

De parameters die werden aangenomen in dit werk zijn gebaseerd op de experimentele waarneming van de polarontoestand door Hu et al.(2016). In het experiment ligt de focus op het bepalen van de polaronenergie bij verschillende koppelingssterkten m.b.v. RF-spectroscopie. Omdat we in deze thesis de evolutie van de correlatie functies bepalen bij een welbepaalde koppelingssterkte is het moeilijk om een rechtstreekse vergelijking te maken. We kunnen wel kijken naar hoe de typische tijdschalen uit het experiment zich verhouden t.o.v. onze resultaten. In het experiment wordt een Gaussische RF puls gebruikt voor het transformeren van kaliumatomen vanuit een inactieve toestand  $|1\rangle$  naar de interagerende toestand  $|2\rangle$ . De intensiteit van de puls is proportioneel aan  $\exp[-t^2/(2\Delta t^2)]$  met een breedte  $\Delta t = 65\mu s$ . De totale tijd van de puls in het experiment bedraagt  $520\mu s$ . Direct na de puls wordt een beeld gemaakt van het BEC en het aantal fermionen in toestand  $|2\rangle$  bepaald. Men neemt dus aan dat de totale pulstijd lang genoeg is voor de onzuiverheid om een Bose polaron te vormen. De tijdschaal waarop het totaal aantal fononen rond de onzuiverheid convergeert volgens onze resultaten, te zien in figuur 5.3, is van de orde  $t_{conv} \sim 5m_I\xi^2/\hbar \approx 128.5\mu s$ . Beide tijdschalen liggen merkwaardig genoeg binnen dezelfde grootteorde. De relaxatietijd voorspeld op basis van de tijdsevolutie van verwachtingswaarde  $N_{\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  is zelfs enkele malen kleiner dan de totale tijd van de puls. Dit resultaat is dus in het voordeel van de aanname dat de onzuiverheden in het BEC gerelaxeerd zijn bij de meting.

Bij de vergelijking van de twee tijden moeten wel enkele kanttekeningen gemaakt worden. Eerst en vooral merken we het verschil op tussen de instantane quench toegepast in dit werk en de eindige RF puls in het experiment. Daarnaast worden in het experiment metingen gedaan bij verschillende koppelingsterkten, terwijl de relaxatietijd werd bepaald specifiek voor  $\alpha = 0.5$ . Het is vooral moeilijk om vanuit deze analyse uitspraken te doen over de relaxatie in het sterke koppelingsregime. Sectie 6.3 komt hier nog op terug. Een ander verschilpunt met het experiment is de potentiaal waarin het BEC opgelost zit. Wij werkten met een uniform gas in een volume  $V$ , maar voor de metingen gebruikten Hu et al.(2016) een harmonische val. Dit wil zeggen dat dichtheid van het condensaat  $n_0$  varieert van nul aan de rand tot zijn bulk waarde in het centrum van de val en dat dus ook polaronen worden gecreëerd over een verdeling van dichtheden. Verder is er ook niet sprake van één geïsoleerde onzuiverheid maar een dichtheid aan fermionen  $n_f$ . In onze aanpak verwaarlozen we met andere woorden mogelijke interacties tussen de fermionen onderling. Verderop in het hoofdstuk komen we ook hier nog op terug. Tot slot merken we nog op dat het experiment uiteraard niet plaatsvindt

bij het absolute nulpunt van de temperatuur, maar bij  $T = 180$  nK. Het systeem vertrekt dus niet van een vacuüm van Bogoliubov excitaties, wat wel werd verondersteld in onze analyse.

## 6.2 Discretisatie en cumulanten expansie

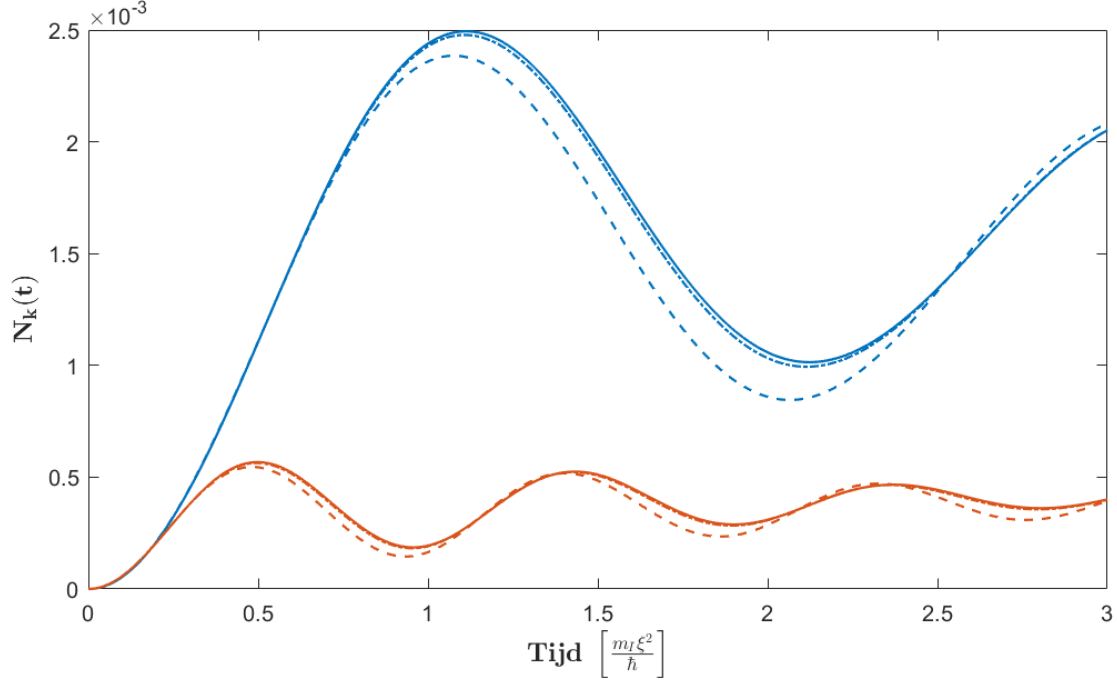
Om het stelsel van differentiaalvergelijkingen computationeel op te lossen waren twee benaderingen cruciaal, namelijk de expansie van  $\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$  in cumulanten en de discretisatie van de momentum ruimte. Het voornaamste waar we ons in de huidige resultaten van bewust moeten zijn is de limiet op de discretisatie, waardoor ook de cut-off  $\Lambda$  beperkt bleef in vergelijking met conventionele cut-off's  $\Lambda \sim 100\xi^{-1}$ . De invloed van de onderbemonstering liet zich vooral merken bij integratie over de resultaten voor de correlaties. De lage cut-off en ruw grid zouden echter ook een invloed kunnen hebben op de dynamica van de cumulanten zelf. Een fijnere discretisatie is praktisch niet mogelijk, maar we kunnen hier wel de vergelijking maken met resultaten voor minder gridpunten. In figuur 6.1 is het verschil te zien in het tijdsverloop van  $N_{\mathbf{k}}$  voor meerdere identieke systemen met als enige verschil de cut-off voor de momenta en het aantal grid-punten. Zoals uit de resultaten al bleek wordt de dynamica van de correlatiefuncties voornamelijk bepaald door de lage k-waarden. Hierdoor is de globale trend van gedempte oscillaties ook voor de zeer lage cut-off  $\Lambda = 10\xi^{-1}$  nog steeds zichtbaar. Het resultaat wordt nog gecorrigeerd door een hogere waarde  $\Lambda = 20\xi^{-1}$  te kiezen. Modes met golfgetal tussen  $10\xi^{-1}$  en  $20\xi^{-1}$  hebben dus een niet verwaarloosbare bijdrage. De correctie is al aanzienlijk kleiner wanneer de cut-off wordt opgetrokken tot  $50\xi^{-1}$ . Verwacht wordt dat de cut-off verder opvoeren de dynamica minimaal zal beïnvloeden, i.e. hoogenergetische excitatiemodes met  $|\mathbf{k}| > 50\xi^{-1}$  hebben geen significante bijdrage. Zoals reeds aangehaald in hoofdstuk 4 zal dit wel een effect hebben op de dichtheidsprofielen en het resultaat voor  $N_{tot}$ .

Door de kwadratische correlatie functies mee te nemen in de differentiaalvergelijkingen wordt de invloed van de verstrengeling tussen de fononen in beeld gebracht. Dit is wel nog steeds een benadering, aangezien alle hogere orden niet of gefactoriseerd worden weergegeven m.b.v. de expansie in cumulanten. Een eerste correctie op onze resultaten zou inhouden de cumulanten van derde orde niet langer nul te veronderstellen. De vergelijkingen in de hiërarchie moeten dan consistent uitgebreid worden, beginnend bij de basis vergelijking:

$$i\partial_t \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle = U_{\mathbf{k}} + \Omega_{\mathbf{k}} \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + \frac{1}{m_I} \sum_{\mathbf{s}}' (\mathbf{s} \cdot \mathbf{k}) \left[ M_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c + \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c \right], \quad (6.1)$$

waar  $M_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c$ ,  $c_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c$  en  $n_{\mathbf{s},\mathbf{k}}^c = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c$ . Deze uitbreiding doorvoeren in de vergelijkingen voor de kwadratische cumulanten is echter niet vanzelfsprekend. Er komen heel wat termen bij in de vergelijkingen. Bovendien is er ook een vierde vergelijking nodig voor de cumulant  $M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c$  om het stelsel te sluiten. Om een idee te geven van de complexiteit





Figuur 6.1: Vergelijking van  $N_{\mathbf{k}}(t)$  voor verschillende cut-off's, nl.  $\Lambda = 50\xi^{-1}$  (volle lijnen),  $\Lambda = 20\xi^{-1}$  (streep-puntlijnen) en  $\Lambda = 10\xi^{-1}$  (streepjeslijnen). De modes die worden weergegeven zijn de excitaties met golfgetallen  $|\mathbf{k}| = 2\xi^{-1}$  (blauw) en  $|\mathbf{k}| = 3\xi^{-1}$  (oranje).

geven we deze in beknopte vorm weer:

$$\begin{aligned}
i\partial_t M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c &= \Omega_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c - (\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}) \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle c_{\mathbf{q},\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{s}}' \left[ (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) F_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^5 - (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle R_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^4 \right. \\
&\quad - (\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{s} \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle K_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^4 + \left( c_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c - \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \right) (\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) M_{\mathbf{q},\mathbf{s}}^* \\
&\quad \left. - \left( n_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^c - \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \right) (\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) M_{\mathbf{q},\mathbf{s}} - \left( n_{\mathbf{q},\mathbf{q}}^c - \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \rangle \langle \hat{a}_{\mathbf{q}} \rangle \right) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) M_{\mathbf{s},\mathbf{k}} \right].
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Hier is  $F_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^5 = \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{s}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle$ ,  $R_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^4 = \langle \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{s}} \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle$  en  $K_{\mathbf{q},\mathbf{s},\mathbf{k}}^4 = \langle \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{s}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle$ . Om dit werkbaar te maken zouden alle correlatie functies binnen de som moeten worden uitgeschreven in functie van hun cumulanten. Er zullen weliswaar nog enkele termen wegvallen en bovendien worden de cumulanten van orde  $N = 4$  en  $N = 5$  gelijk aan nul verondersteld. Het uitgebreide stelsel oplossen zal veel meer computationeel rekenwerk nodig hebben en was niet haalbaar binnen het tijdsframe van de thesis.

### 6.3 Geldigheid van het Fröhlich model

In dit werk werd de onzuiverheid in het bad van bosonen voorgesteld door de zogenaamde Fröhlich-Bogoliubov Hamiltoniaan. Om tot deze uitdrukking te komen werden wel enkele benaderingen gemaakt die de geldigheid ervan beperken. Een eerste aanname was uiteraard

de Bogoliubov benadering waarbij driedeeltjesinteracties verwaarloosd werden. In §2.3 werd al aangehaald dat deze voor fonon-fonon interacties zorgen, met een eindige levensduur voor de quasi-deeltjes als gevolg. Dit kan gekarakteriseerd worden door een vervaltijd  $\tau$  waarvoor geldt [23]:

$$\tau \sim (n_0 a_{BB}^3)^{-1/2} \frac{m_B \xi^2}{\hbar} \approx 190 \frac{m_B \xi^2}{\hbar}. \quad (6.3)$$

Hier werden de parameters van ons systeem ingevuld, namelijk  $n_0 = 1.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  en  $a_{BB} = 100a_0$ . De tijdschaal waarop de fundamentele excitaties vervallen blijkt dus vele malen groter dan de tijdschalen relevant voor de vorming van het polaron.

Verder werd ook een zwakke koppeling verondersteld door tweefononinteracties te verwaarlozen. Deze aanname beperkt zeer sterk de mogelijkheid om de vergelijking te maken met experimenten die meestal rond een Feshbach resonantie werken en dus ook het sterke koppelingsregime bestuderen. We kunnen op basis van onze resultaten niets zeggen over de vorming van een Bose polaron voor  $\alpha > 1$ . Uit een aantal studies is al gebleken dat beschrijvingen die verder gaan dan de Fröhlich benadering vaak dichter aanleunen bij de experimentele observaties in het regime van sterke koppeling [46–48]. Hier bekijken we kort de Hamiltoniaan wanneer we voorbij het Fröhlich model gaan door de interactieterm  $g_{IB} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}$  niet langer te verwaarlozen. Uitgedrukt in de basis van Bogoliubov excitaties is de Hamiltoniaan dan

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Bog} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}}' \omega_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \frac{\hat{p}_I^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k}}' U_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\ + g_{IB} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}' \left[ \hat{\rho}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} (u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} + \hat{\rho}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left( v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{q}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

De correctie leidt dus tot gelijktijdige excitaties van meerdere modes. Ook hier kan men de LLP transformatie naar het referentiestelsel van de dynamische onzuiverheid doorvoeren zodat

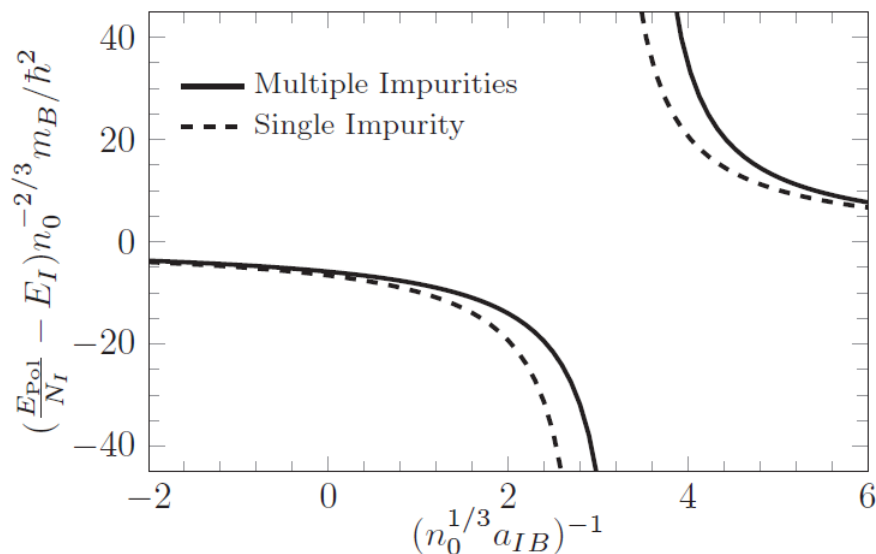
$$\begin{aligned} \hat{H}_{LLP} = E_0 + \frac{1}{2m_I} \left( \mathbf{p}_I - \sum_{\mathbf{k}}' \mathbf{k} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \right)^2 + \sum_{\mathbf{k}}' \left[ \omega_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + U_{\mathbf{k}} \left( \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] \\ + g_{IB} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}' \left[ (u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}}) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{q}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \right]. \end{aligned} \quad (6.5)$$

De benadering van de Lippman-Schwinger vergelijking tot op eerste orde in  $g_{IB}$  volstaat niet langer bij overgang naar sterkere koppelingen. Hier zullen immers ook hogere momenta een belangrijkere bijdrage leveren. De benadering van de interactie als contactpotentiaal gaat dus niet meer op. In hoofdstuk 3 werd reeds gesproken over een hernormalisering van de interactiesterkte, die overeenkomt met een eindig bereik van de orde  $1/\Lambda$ , de inverse van de momentum cut-off. Deze wordt ook in de analyse van de dynamica voor sterke koppeling onvermijdelijk. Drescher et al.(2019) bestudeerde reeds de vorming van een Bose polaron voor

dit model met dezelfde soort quench als toegepast in dit werk. Zij maakten hiervoor echter gebruik van de tijdsafhankelijke LLP aanpak (4.34). De methode toegepast in dit werk heeft het potentiël om ook voor deze Hamiltoniaan verder te gaan dan de MF benadering en verstrengeling tussen verschillende modes deels in rekening te brengen, allezins voor  $\mathbf{p}_I = 0$ . De bewegingsvergelijking voor  $N_{\mathbf{k}}$  is hier dan

$$\partial_t N_{\mathbf{k}} = -2U_k \text{Im}\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle - 2g_{IB} \sum_{\mathbf{s}}' \left[ (u_k u_s + v_k v_s) \text{Im}\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{s}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle + (v_k u_s + u_k v_s) \text{Im}\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{s}} \rangle \right]. \quad (6.6)$$

In principe zou opnieuw een hiërarchie van vergelijkingen kunnen worden opgesteld die bij een bepaalde orde wordt getrunkeerd. Het kan hier interessant zijn om, in toekomstige studies, tot op tweede orde te werken en bijvoorbeeld het effect van de extra interactietermen te bestuderen in functie van de koppelingsconstante  $\alpha$ . De effecten van deze extra interactietermen in de polaronenergie zijn reeds geanalyseerd binnen het formalisme van renormalisatie groepentheorie [49] en op basis van de coherente toestand aanname (LLP) [49, 50]. Iets dat in dit werk werd verwaarloosd, maar wel door Van Loon et al.(2018) onderzocht werd is de invloed van een dichtheid aan onzuiverheden. De vergelijking van de energiespectra voor één en meerdere onzuiverheden is gegeven in figuur 6.2. Daar is een verschuiving in de resonantie positie te zien, deels als gevolg van de tweefononinteracties en deels te wijten aan het veeldeeltjeskarakter van de onzuiverheden. Men kan zich dan afvragen of het aannemen van een geïsoleerde onzuiverheid wel gerechtvaardigd is in vergelijking met het experiment. Om hierop eenduidig antwoord te kunnen formuleren is verder onderzoek vereist.



Figuur 6.2: De polaronenergie in functie van de s-golf verstrooiingslengte  $a_{IB}$  voor  $N_I$  fermionen in een BEC (volle lijnen). De parameters zijn dezelfde als werden aangenomen in §4, nl.  $n_0 = 1.8 \times 10^{14} \text{cm}^3$ ,  $a_{BB} = 100a_0$  en  $m_B/m_I = 2.19$ . Het resultaat wordt vergeleken met het resultaat voor een enkele onzuiverheid uit Ref. [22] (stippenlijnen). (Overgenomen uit Ref. [50])

## 6.4 Toekomstperspectief

De resultaten in dit werk laten nog ruimte voor verschillende verbeteringen en uitbreidingen. In de nabije toekomst verwachten we uiteraard de nauwkeurigheid van de huidige resultaten op te voeren door een hogere cut-off te nemen in combinatie met een fijnere discretisatie. Hiervoor kan de huidige implementatie in MATLAB geoptimaliseerd worden. Gezien de dynamica van de correlatie functies weinig wordt beïnvloed hierdoor (zie figuur 6.1) zal dit voornamelijk betere resultaten opleveren voor  $N_{tot}(t)$  en de dichtheidsprofielen in de reële ruimte. Verder kan er ook nagedacht worden over andere algoritmen voor het oplossen van de differentiaalvergelijkingen. Voorlopig lijkt de RK4 methode echter wel het meest geschikt voor de implementatie van dit specifieke probleem. Binnen de verzameling van Runge-Kutta methodes is er echter nog ruimte voor bijvoorbeeld een adaptieve tijdsstap als een soort van foutcontrole of een eventuele uitbreiding naar hogere orde Runge-Kutta algoritmen, i.e. meer functie evaluaties, voor een betere nauwkeurigheid.

Zoals hierboven al aangehaald is er ook de mogelijkheid de truncatie van het stelsel bij hogere orden door te voeren, i.e. de cumulanten van bijvoorbeeld orde  $N = 3$  niet gelijk aan nul stellen. Hiermee worden nieuwe variabelen geïntroduceerd in de hiërarchie en dus ook de nieuwe vergelijking (6.2). De complexiteit hiervan en de verwachting dat hogere orde steeds kleinere effecten zullen hebben maakt deze uitbreiding echter minder aantrekkelijk. De huidige numerieke analyse toepassen op het systeem voorbij de Fröhlich benadering lijkt op het eerste zicht interessanter. Het ziet ernaar uit dat hiervoor minder drastische aanpassingen nodig zouden zijn en bovendien wordt hiermee het koppelingsregime significant uitgebreid. Zeer interessant is ook de uitbreiding naar een mobiele onzuiverheid met een initiële impuls  $\mathbf{p}_I \neq 0$ . Dit zou bijvoorbeeld een waarde kunnen geven voor de effectieve massa van het Bose polaron voorbij de mean field benadering [23]. De analyse aanpassen voor eindige impuls is echter niet vanzelfsprekend aangezien de sferische symmetrie van het probleem hiermee wordt verbroken. Er zullen meer vrijheidsgraden zijn die men moet bijhouden. De implementatie hiervan zal ook aanzienlijke veranderingen vergen in het huidige rekenalgoritme.

# Conclusie

Het domein van kwantum veeldeeltjessystemen ver uit evenwicht is vandaag de dag nog relatief onbekend. Een paradigmatisch probleem dat in recente studies centraal staat is dat van een onzuiverheid in een reservoir van bosonen. Zulke mobiele onzuiverheden in een bosonbad vormen quasi-deeltjes genaamd Bose polaronen. Recent werden in twee parallele experimenten zulke Bose polaronen waargenomen. De vorming van een dergelijke toestand is echter nog niet uitvoerig bestudeerd. Hierdoor gemotiveerd werd in deze thesis een numerieke analyse gemaakt van de unitaire dynamica van een dergelijk systeem na een kwantum quench. Eerdere studies die dit probleem als focus hadden maakten steeds gebruik van de aanname van een coherente toestand van het systeem. Hier werd getracht voorbij deze aanname te gaan en ook verstrengeling tussen de fononen in het systeem tot op zekere hoogte in rekening te brengen. De tijdsevolutie van het aantal fononen na de quench werd bepaald via het Ehrenfest theorema resulterend in een oneindige set van vergelijkingen die werd benaderd a.d.h.v. een expansie in cumulanten. De verstrengeling introduceert eerst en vooral een demping in de oscillaties van de bezetting van de aparte fononmodes. Er vindt een relaxatie van de dynamica plaats, d.w.z. dat de verwachtingswaarden van de enkeledeeltjesoperatoren convergeren naar stationaire waarden. De resultaten tonen verder dat het totaal aantal fononen dat bijdraagt tot de vorming van het polaron consistent hoger ligt in vergelijking met vorige studies. Om de evolutie in de reële ruimte te tonen werden ook dichtheidsprofielen opgesteld op verschillende tijden na de quench.

# A | LLP transformatie

Om te transformeren naar het referentiestelsel van de onzuiverheid wordt

$$\hat{U}_{LLP} = \exp(-i\hat{S}) \quad \text{met} \quad \hat{S} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (\text{A.1})$$

toegepast op de hamiltoniaan, waar  $\hat{\mathbf{r}}$  de plaatsoperator van de onzuiverheid is. Met de Baker-Campbell-Hausdorff relatie

$$e^{\lambda\hat{G}} \hat{A} e^{-\lambda\hat{G}} = \hat{A} + \lambda [\hat{G}, \hat{A}] + \frac{\lambda^2}{2!} [\hat{G}, [\hat{G}, \hat{A}]] + \dots + \frac{\lambda^n}{n!} [\hat{G} [\hat{G} \dots [\hat{G}, \hat{A}] \dots]] + \dots \quad (\text{A.2})$$

kan de werking op de verschillende termen van de hamiltoniaan  $\hat{H}_{Bog}$  (2.41) bepaald worden. Dankzij het unitaire karakter van de canonische transformatie volstaat de inwerking op de drie operatoren  $\mathbf{p}_I$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  en  $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ :

$$\begin{aligned} \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{U}_{LLP} &= \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \exp(i\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k}); & \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{LLP} &= \hat{a}_{\mathbf{k}} \exp(-i\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{k}); \\ \hat{U}_{LLP}^{-1} \mathbf{p}_I \hat{U}_{LLP} &= \hat{\mathbf{p}}_I - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Dit is voldoende om de volledige transformatie van  $\hat{H}_{Bog}$  door te voeren.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{LLP} &= \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{H}_{Bog} \hat{U}_{LLP} \\ &= E_0 + \frac{1}{2m_I} \left( \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{\mathbf{p}}_I \hat{U}_{LLP} \right)^2 + \sum'_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{U}_{LLP} \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{LLP} \\ &\quad + \sum'_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} \left( \hat{\rho}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{LLP} + \hat{\rho}_{\mathbf{k}}^* \hat{U}_{LLP}^{-1} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{U}_{LLP} \right) \\ &= E_0 + \frac{1}{2m_I} \left( \mathbf{p}_I - \sum'_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \right)^2 + \sum'_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum'_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} \left( \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

## B | Matlab code

Deze appendix bevat de voornaamste MATLAB implementaties die gebruikt werden om de resultaten in hoofdstuk 5 te berekenen.

### B.1 Discretisatie

De functie *make\_grid* definiëert een grid waarop het stelsel van vergelijkingen wordt opgelost. Daarnaast worden ook de dispersie relatie, interactiesterkte, kinetische energie en integratiefuncties gedefiniëerd.

```
1 function make_grid(obj, kk, n_c)
2 % Radial discretization
3 kk = sort(kk); % Sorts in ascending order
4 grid.kk = kk;
5 bounds = [kk(1)/2 (kk(2:end)+kk(1:end-1))/2 3/2*kk(end)-kk(end-1)/2];
6 grid.d_k = diff(bounds);
7 grid.V = (2*pi/grid.kk(1))^3;
8 grid.n_k = length(kk);
9
10 % Uniform discretization of cosine(theta)
11 c_min = -1; c_max = 1;
12 grid.cc = linspace(c_min, c_max, n_c);
13 grid.d_c = grid.cc(2)-grid.cc(1);
14 grid.n_c = n_c;
15 grid.theta = acos(grid.cc);
16
17 % Uniform distribution of phi
18 phi_min = 0; phi_max = 2*pi;
19 grid.phi = linspace(phi_min, phi_max, n_c);
20 grid.d_phi = grid.phi(2) - grid.phi(1);
21
22 % Define 3D k, q and cos(theta):
23 [grid.kk_3D, grid.qq_3D, grid.cc_3D] = meshgrid( grid.kk, grid.kk, ...
24         grid.cc );
25 % Reordering q-part
26 thetakq = permute(grid.theta, [1,3,2]);
27 thetaqs = sin(thetakq).*sin(grid.theta.').*cos(grid.phi) ...
28         + cos(grid.theta.').*cos(thetakq);
29 grid.indtqs = zeros(n_c,n_c,n_c);
```

```

30     for i = 1:n_c
31         for j = 1:n_c
32             for l = 1:n_c
33                 [n, grid.indtqs(i,j,l)] = min( ...
34                     abs(thetaqs(i,j,l)-grid.theta) );
35             end
36         end
37     end
38     %% Define Hamiltonian parameters
39     mB = obj.mB; mI = obj.mI; a = obj.a;
40     mu = (1/mB + 1/mI)^(-1);
41
42     %% Interaction strength
43     Uk_f = @(k) sqrt(pi/(2*mu^2*grid.V))*((a*k).^2./(k.^2+2)).^(1/4);
44     %%Dispersion Bog exc.
45     Wk_f = @(k) k/(2*mB).*sqrt(k.^2+2);
46     %%Impurity free energy
47     Ek_f = @(k) k.^2/(2*mI);
48
49     grid.Uk = Uk_f(kk); grid.Wk = Wk_f(kk); grid.Ek = Ek_f(kk);
50     grid.Wk_3D = Wk_f(grid.kk_3D); grid.Wq_3D = Wk_f(grid.qq_3D);
51     grid.Ek_3D = Ek_f(grid.kk_3D); grid.Eq_3D = Ek_f(grid.qq_3D);
52
53     %% (k+q)^2 en k.q
54     grid.kpq2 = grid.kk_3D.^2 + grid.qq_3D.^2 + ...
55         2*grid.kk_3D.*grid.qq_3D.*grid.cc_3D;
56     grid.ktq = grid.kk_3D.*grid.qq_3D.*grid.cc_3D;
57
58     %% Integrate function over q
59     qq_weight = repmat( (grid.d_k.*grid.kk.^3).', 1, grid.n_k );
60     c_weight = permute(grid.d_c*grid.cc,[1,3,2]);
61     cc_weight = repmat(c_weight, grid.n_k, grid.n_k, 1);
62
63     %% Inline function to sum over q vector, which depends on |q| and theta
64     integr_q = @(x) grid.V/(2*pi)^2*sum(qq_weight.*sum(cc_weight.*x, 3), 1);
65
66     %% Inline function to sum over s vector, which depends on |s| and theta ...
67     (phi is already integrated over)
68     integr_s = @(x) grid.V/(2*pi)^3*sum(qq_weight.*sum(cc_weight.*x, 3), 1);
69
70     %% Copy back onto class
71     obj.grid = grid;
72     obj.integr_q = integr_q;
73     obj.integr_s = integr_s;
74 end

```

## B.2 Tijdsevolutie

De functie *evolve* evolueert de variabelen  $N_{\mathbf{k}} = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ ,  $A = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle$ ,  $C = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c$  en  $N = \langle \hat{\alpha}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle_c$  over een tijd  $t_{\text{run}}$  met een differentiële tijdstap  $dt$  aan de hand van een RK4-methode.



De ingebouwde functie *differentials* maakt de nodige evaluaties voor dit proces.

```

1 function evolve(obj, t_run, dt)
2 %% Copy some object variables into local ones
3 % Time
4 t = obj.T; kk = obj.grid.kk;
5 n_k = obj.grid.n_k; n_c = obj.grid.n_c;
6 indtqs = obj.grid.indtqs;
7 kpq2 = obj.grid.kpq2; ktq = obj.grid.ktq;
8 mI = obj.mI;
9
10 % Interactions amplitude and bogoliubov dispersion relations
11 Uk = obj.grid.Uk; Wk = obj.grid.Wk; Ek = obj.grid.Ek;
12 Wk_3D = obj.grid.Wk_3D; Wq_3D = obj.grid.Wq_3D;
13 Ek_3D = obj.grid.Ek_3D; Eq_3D = obj.grid.Eq_3D;
14
15 % Loading the variables
16 n = obj.n; A = obj.A; %n = # phonons, A = linear correlation function
17 C = obj.C; N = obj.N; %C and N are the quadratic correlation functions
18
19 % Integration functions
20 integr_q = obj.integr_q;
21 integr_s = obj.integr_s;
22 %% Time loop with RK4 althorithm
23 Nt = floor(t_run/dt); % Number of differential time steps
24 for it = 1:Nt
25
26     %k1
27     [k1_n, k1_A, k1_C, k1_N] = differentials(A, C, N);
28     %k2
29     [k2_n, k2_A, k2_C, k2_N] = differentials(A + dt/2*k1_A, ...
30         C + dt/2*k1_C, N + dt/2*k1_N);
31     %k3
32     [k3_n, k3_A, k3_C, k3_N] = differentials(A + dt/2*k2_A, ...
33         C + dt/2*k2_C, N + dt/2*k2_N);
34     %k4
35     [k4_n, k4_A, k4_C, k4_N] = differentials(A + dt*k3_A, ...
36         C + dt*k3_C, N + dt*k3_N);
37
38     %Update
39     n = n + dt/6*(k1_n + 2*k2_n + 2*k3_n + k4_n);
40     A = A + dt/6*(k1_A + 2*k2_A + 2*k3_A + k4_A);
41     C = C + dt/6*(k1_C + 2*k2_C + 2*k3_C + k4_C);
42     N = N + dt/6*(k1_N + 2*k2_N + 2*k3_N + k4_N);
43
44     %Update time
45     t = t+dt;
46 end
47 %% Copy results of integration back onto class
48 obj.n = n; obj.A = A;
49 obj.C = C; obj.N = N;
50 obj.T = t; % Current time
51 obj.T_step = obj.T_step+1;

```

```

52 obj.T_list(end+1) = t;
53
54 %% Differential steps
55 function [d_n, d_A, d_C, d_N] = differentials(A_1, C_1, N_1)
56
57     d_n = -2*Uk.*imag(A_1);
58
59     d_A = -1i*(Uk + (Wk + Ek).*A_1 + kk/mI.*(integr_q(C_1.*conj(A_1).') ...
60         + integr_q(N_1.*A_1.')));
61
62     sumAA = zeros(n_k,n_k,n_c);
63     sumAdA = zeros(n_k,n_k,n_c);
64     for j = 1:n_k
65         for l = 1:n_c
66             Cin = squeeze(C_1(:,j,:));
67             Nin = squeeze(N_1(:,j,:));
68             Cout = Cin(:,indtqs(:, :, 1));
69             Nout = Nin(:,indtqs(:, :, 1));
70             qpartC = ...
71                 obj.grid.d_phi*squeeze(sum(reshape(Cout,n_k,n_c,n_c), 3));
72             qpartN = ...
73                 obj.grid.d_phi*squeeze(sum(reshape(Nout,n_k,n_c,n_c), 3));
74
75             sumAA(j, :, 1) = kk.*integr_s((conj(A_1).'*A_1 + ...
76                 N_1).*permute(qpartC,[1,3,2]) + (A_1.*A_1 + ...
77                 C_1).*permute(qpartN,[1,3,2]));
78
79             sumAdA(j, :, 1) = kk.*integr_s((conj(A_1).'*A_1 + ...
80                 N_1).*permute(conj(qpartN),[1,3,2]) + (A_1.*A_1 + ...
81                 C_1).*permute(conj(qpartC),[1,3,2]));
82
83         end
84     end
85
86     d_C = -1i*((Wk_3D + Wq_3D + kpq2/(2*mI)).*C_1 + ktq/mI.*A_1.*A_1.' ...
87         + 1/mI*(sumAA + permute(sumAA,[2 1 3])));
88
89     d_N = -1i*((Wk_3D - Wq_3D + Ek_3D - Eq_3D).*N_1 + ...
90         1/mI*(sumAdA + permute(conj(sumAdA),[2 1 3])));
91
92 end
93 end

```

# Bibliografie

- [1] C.J. Pethick, H. Smith, *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*, 1<sup>st</sup> ed., Cambridge University Press (2002).
- [2] A. Einstein, Quantentheorie des einatomigen idealen Gases, *Sitz.ber. Preuss. Akad. Wiss. Phys* 1, 261-267 (1925).
- [3] S.N. Bose, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese, *Zeitschrift für Physik* 26, 178-181 (1924).
- [4] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman, E.A. Cornell, Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, *Science* 269, 198-201 (1995)
- [5] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollet, R.G. Hulet, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, *Phys. Rev. Let.* 75, no 9, 1687-1690 (1995).
- [6] K.B. Davis, M.O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, W. Ketterle, Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms, *Phys. Rev. Let.* 75, no 22, 3969-3973 (1995).
- [7] J.T.L. Devreese, *Fröhlich Polarons: Lecture course including detailed theoretical derivations*, 5<sup>th</sup> ed., University of Antwerp (2015).
- [8] S. I. Pekar, *J. Phys. USSR* 10, 341 (1946).
- [9] J. Tempere, *Course notes for Solid State Physics II*, University of Antwerp (2020).
- [10] H. Fröhlich, Electrons in Lattice Fields, *Adv. Phys.* 3, 325-361 (1954).
- [11] S.N. Klimin, J. Tempere, V.R. Misko, M. Wouters, Finite-temperature Wigner solid and other phases of ripplonic polarons on a helium film, *Eur. Phys. J. B* 89 (2016).
- [12] V. Sa-Yakanit, V.D. Lakhno, K. Hass, Path-integral approach to single-particle excitation in Coulomb systems, *Phys. Rev. B* 57, 5772-5777 (1997).
- [13] G.D. Mahan, in J.T. Devreese (Ed.), *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*, Amsterdam: North-Holland, 553-657 (1972).
- [14] T.D. Lee, F.E. Low, D. Pines, The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal, *Phys. Rev.* 90, 297-302 (1953).

- [15] L.D. Landau, S.I. Pekar, The Effective Mass of The Polaron, *Zh. Eksper. Teor. Fiz.* 18, 419-423 (1948).
- [16] N.N. Bogoliubov, S.V. Tyablikov, *Zh. Eksp. i Teor. Fiz.* 19, 256 (1949).
- [17] R.P. Feynman, Slow Electrons in a Polar Crystal, *Phys. Rev.* 97, 660-665 (1955).
- [18] J.M. Deutsch, Eigenstate Thermalization Hypothesis, *Rep. Prog. Phys* 81, 082001 (2018).
- [19] M. Van Regemortel, *Quasi-particles in out-of-equilibrium quantum systems: correlations and equilibration*, Phd-Thesis, University of Antwerp (2018).
- [20] M. Van Regemortel, H. Kurkjian, M. Wouters, Prethermalization to thermalization crossover in a dilute Bose gas following an interaction ramp, *Phys. Rev. A* 98, 053612 (2018).
- [21] C.B. Dag, S.T. Wang, L.M. Duan, Classification of Quench Dynamical Behaviours in Spinor Condensates, *Phys. Rev. A* 97, 023603 (2018).
- [22] Y.E. Shchadilova, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, Quantum dynamics of ultracold Bose polarons, *Phys. Rev. Lett.* 117, 113002 (2016).
- [23] M. Drescher, M. Salmhofer, T. Enss, Real space dynamics of attractive and repulsive polarons in Bose-Einstein condensates, *Phys. Rev. A* 99, 023601 (2019).
- [24] W. Casteels, *Ultracold Gases as a Quantum Simulator for the Polaron*, Phd-thesis, University of Antwerp (2013).
- [25] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, E. Tiesinga, *Feshbach Resonances in Ultracold Gases*, *Rev. Mod. Phys.*, 82, 1225-1286 (2010).
- [26] F. Ferlaino, R. Grimm, Forty years of Efimov physics: How a bizarre prediction turned into a hot topic, *Physics* 3, 9 (2010).
- [27] N.N. Bogoliubov, On the theory of superfluidity, *J. Phys. USSR* 11, 23-32 (1947).
- [28] J. Tempere, *Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity*, University of Antwerp (2020).
- [29] E. Hodby, O.M. Maragò, G. Hechenblaikner, C.J. Foot, Experimental Observation of Beliaev Coupling in a Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* 86, 2196-2199 (2001).
- [30] G.Menegoz, A.Silva, Prethermalization of weakly interacting bosons after a sudden interaction quench, *J. Stat. Mech.* 2015, 05035 (2015).
- [31] M. Van Regemortel, W. Casteels, I Carusotto, M. Wouters, Spontaneous Beliaev-Landau scattering out of equilibrium, *Phys. Rev. A* 96, 053854 (2017).

- [32] M. Prüfer, P. Kunkel, H. Strobel, S. Lannig, D. Linnemann, C. Schmied, J. Berges, T. Gasenzer, M.K. Oberthaler, Observation of universal dynamics in a spinor Bose gas far from equilibrium, *Nature* 563, 217-220 (2018).
- [33] F. Grusdt and E. Demler, New theoretical approaches to Bose polarons, *Proc. of the Int. School of Physics ‘Enrico Fermi’* 191 (2015).
- [34] N.B. Jørgensen, L. Wacker, K.T. Skalmstang, M.M. Parish, J. Levinsen, R.S. Christensen, G.M. Bruun, J.J. Arlt, Observation of Attractive and Repulsive Polarons in a Bose-Einstein Condensate, *Phys. Rev. Lett.* 117, 055302 (2016).
- [35] M.G. Hu, M.J. Van de Graaff, D. Kedar, J.P. Corson, E.A. Cornell, D.S. Jin, Bose Polarons in the Strongly Interacting Regime, *Phys. Rev. Lett.* 117, 055301 (2016).
- [36] J. Tempere, W. Casteels, M. K. Oberthaler, S. Knoop, E. Timmermans, J. T. Devreese, Feynman path-integral treatment of the BEC-impurity polaron, *Phys. Rev. B* 80, 184504 (2009).
- [37] M. Rigol, V. Dunjko, M. Olshanii, Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems, *Nature* 452, 854-858 (2008).
- [38] M. Rigol, Quantum quenches and thermalization in one-dimensional fermionic systems, *Phys. Rev. A* 80, no. 5, 053607 (2009).
- [39] M. Kardar, 8.333 Statistical Mechanics I: Statistical Mechanics of Particles. Fall 2013, *Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare*, <https://ocw.mit.edu>, License: Creative Commons BY-NC-SA (2013).
- [40] J. Fricke, Transport equations including many-particle correlations for an arbitrary quantum system. General formalism, *Ann. Phys.* 252, 479-498 (1996).
- [41] T. Köhler, K. Burnett, Microscopic quantum dynamics approach to the dilute condensed Bose gas, *Phys. Rev. A* 65, 033601 (2002).
- [42] F. Grusdt, Y. E. Shchadilova, A. N. Rubtsov, E. Demler, Renormalization group approach to the Fröhlich polaron model: application to impurity-BEC problem, *Scientific Reports* 5, 12124 (2015).
- [43] Y. E. Shchadilova, F. Grusdt, A. N. Rubtsov, E. Demler, Polaronic mass renormalization of impurities in BEC: correlated Gaussian wavefunction approach, *Phys. Rev. A* 93, 043606 (2016).
- [44] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3<sup>rd</sup> ed., Cambridge University Press (2007).
- [45] M. Milosevic, *Numerical Methods*, University of Antwerp (2016).
- [46] S.P. Rath, R Schmidt, Field-theoretical study of the Bose polaron, *Phys. Rev. A* 88, 053632 (2013).

- 
- [47] L.A. Peña Ardila, S. Giorgini, Impurity in a Bose-Einstein condensate: study of the attractive and repulsive branch using quantum Monte-Carlo methods, *Phys. Rev. A* 92, 033612 (2015).
- [48] A. Camacho-Guardian, G.M. Bruun, Landau effective interaction between quasiparticles in a Bose-Einstein condensate, *Phys. Rev. X* 8, 031042 (2018).
- [49] F. Grusdt, R. Schmidt, Y. E. Shchadilova, E. Demler, Strong coupling Bose polarons in a BEC, *Phys. Rev. A* 96, 013607 (2017).
- [50] S. Van Loon, W. Casteels, J. Tempere, Ground-state properties of interacting Bose polarons, *Phys. Rev. A*, 98, 063631 (2018).