Universiteit Antwerpen

Master Thesis

Invloed van de breking van integrabiliteit op de dynamica van spinor Bose-Einstein condensaten

Auteur:
Manon Van Hoorebeke

Promotor:
Michiel Wouters

Copromotor:
Lennart Fernandes

Proefschrift ter verkrijging van de graad van Master in de Fysica

Theorie van Kwantumsystemen en Complexe systemen
Departement Fysica, Faculteit Wetenschappen

27 mei 2024

„*What I love about science is that as you learn, you don't really get answers. You just get better questions.*"

- John Green

Abstract

Thermalization of out-of-equilibrium systems as they evolve towards equilibrium and the accompanying energy and timescales have been a subject of study for many years. The sufficient criteria for thermalization in quantum systems still pose many questions today. Some progress was made with the 'Eigenstate thermalization hypothesis (ETH)' and experiments on non-thermalizing dynamics of 1D bosons leading to the conclusion that the integrability of a system can play a keyrole when it comes to reaching thermal equilibrium. Integrability can be loosely defined as a system having a (large) number of operators commutating with the Hamiltonian and each other. The constants of motion that arise as a consequence restrict the ergodic sampling of the Hilbert space, preventing the system from reaching thermal equilibrium. Instead, a relaxation to a generalised equilibrium state derived from a Gibbs ensemble taking into account the different constants of motion is known to take place.

In this thesis we study the effect of the breaking of integrability on the dynamics of spinor Bose-Einstein condensates brought out of equililibrium by a sudden quench of the magnetic field. We build upon previous work done for the integrable system, both experimental (Evrard et al.) and theoretical (Fernandes et al.). The results for the integrable system are reproduced, after which integrability is broken by the addition of a symmetry breaking term to the Hamiltonian. This breaks the conservation of magnetisation that leads the system to be integrable, and we study the subsequent evolution towards thermal equilibrium in the dynamics.

For our numerical study of the dynamics, we use both exact calculations with the quantum Hamiltonian (for a relatively small number of particles) and the semiclassical truncated Wigner approximation (valid for a sufficiently large particle number). For the interpretation of the oscillation frequencies, we rely on the Bogoliubov approximation for the elementary excitations.
The various kinds of dynamics that were observed revealed that an intricate balance between the different interaction parameters of the Hamiltonian was needed to reach the expected evolution towards thermal equilibrium. Quite unexpectely, and although the dynamics clearly moves away from the generalised equilibrium observed for the integrable system and comes close to thermal equilibrium, full thermalization was never reached.

Samenvatting

De thermalisatie van niet-evenwichtssystemen tijdens hun evolutie naar evenwicht en de bijhorende energie- en tijdsschalen zijn al vele jaren een veel bestudeerd onderwerp. De voldoende voorwaarden voor thermalisatie in kwantumsystemen roepen zelfs vandaag de dag nog vele vragen op. Enige vooruitgang werd geboekt met de 'Eigenstate thermalization hypothesis (ETH)' en experimenten naar niet-thermaliserende dynamica in 1D bosonen. Dit leidde tot de conclusie dat de integrabiliteit van een systeem een belangrijke rol speelt bij het bereiken van thermisch evenwicht. Over het algemeen kan een systeem integreerbaar genoemd worden wanneer het een (groot) aantal operatoren heeft die commuteren met de Hamiltoniaan en elkaar. De constanten van beweging die hieruit voortvloeien beperken de ergodische verkenning van de Hilbertruimte en verhinderen dat thermisch evenwicht wordt bereikt. In plaats daarvan relaxeert het systeem naar een veralgemeend evenwicht, afgeleid uit een Gibbs ensemble dat deze behouden grootheden in rekening neemt.

In deze thesis bestuderen we het effect van de breking van integrabiliteit op de dynamica van spinor Bose-einstein condensaten die uit evenwicht worden gebracht door een plotse quench van het magnetisch veld. We bouwen verder op eerder werk dat is uitgevoerd voor het integreerbare systeem, zowel experimenteel (Evrard et al.) als theoretisch (Fernandes et al.). Eerst worden de resultaten voor het integreerbare systeem gereproduceerd, waarna de integrabiliteit wordt gebroken door een symmetriebrekende term toe te voegen aan de Hamiltoniaan. Dit verbreekt het behoud van magnetisatie dat het systeem integreerbaar maakt, en we bestuderen de daaropvolgende evolutie naar thermisch evenwicht in de dynamica.

Voor de numerieke studie van de dynamica wordt zowel gebruik gemaakt van een exacte oplossing met de kwantumhamiltoniaan (voor een relatief klein aantal deeltjes) als van de semiklassieke truncated Wigner benadering (geldig voor een groot aantal deeltjes). Voor de interpretatie van de oscillatiefrequenties steunen we op de Bogoliubov benadering voor elementaire excitaties. De uiteenlopende soorten dynamica die werden waargenomen, toonden aan dat een ingewikkelde balans tussen de verschillende interactieparameters van de Hamiltoniaan nodig was om de verwachte evolutie naar thermisch evenwicht te bekomen. Verrassend genoeg werd volledige thermalisatie nooit bereikt, ondanks dat de dynamica zich duidelijk weg beweegt van het veralgemeend evenwicht dat wordt waargenomen voor het integreerbare systeem en dicht bij thermisch evenwicht komt.

Dankwoord

Terugkijkend op de afgelopen vijf jaar, kan ik nauwelijks geloven hoe snel ze zijn voorbijgevlogen. Mijn studietijd zat vol met momenten van blijdschap, af en toe wat frustratie en hier en daar een (gezonde) dosis stress, maar natuurlijk vooral een voortdurende verwondering voor de wereld van de fysica.

Aan het begin van de afsluiting van deze vijf mooie jaren verdienen enkele mensen een woord van dank.

Specifiek voor deze thesis gaat mijn dank uit naar mijn promotor, professor Michiel Wouters. Allereerst voor het aanbieden van dit interessante onderwerp, maar ook voor zijn beschikbaarheid, enthousiasme en om altijd klaar te staan om eender welke vraag te beantwoorden, zelfs als deze misschien een beetje dom aanvoelde. Ook mijn co-promotor Lennart Fernandes verdient mijn dankbaarheid voor enthousiaste gesprekken en suggesties en het verschaffen van zijn code als startpunt om op verder te bouwen om zijn werk voort te zetten. Ook voor zijn bereidheid om code en berekeningen te bekijken wanneer ik eens vastzat, en resultaten te bespreken zelfs vanaf de andere kant van de wereld ben ik hem dank verschuldigd.

Ik ben mijn ouders ook eeuwig dankbaar voor hun aanmoediging om de sprong te wagen en fysica te gaan studeren. Het verlangen om te blijven leren, dat vandaag de dag nog steeds aanwezig is, werd destijds misschien enigszins overschaduwd door een lichte onzekerheid over wat er allemaal op mij stond te wachten, die in mindere mate ook nog steeds aanwezig is vandaag. Deze ervaring heeft me enorm geholpen om zowel academisch als persoonlijk te groeien, hopelijk ten goede. Bedankt om mij steeds aan te moedigen in al mijn ondernemingen.

Nu ik met enige nostalgie kan terugkijken op deze jaren zijn deze, hoe cliché het ook klinkt, effectief enkele van de beste jaren van mijn leven tot nu toe geweest. Dit is mede dankzij de geweldige professoren en assistenten hier aan de UAntwerpen; ik kan me alleen maar gelukkig prijzen dat ik hier beland ben. Maar ook de vriendschappen die in deze jaren gesmeed zijn, mogen niet vergeten worden. Bedankt Lies, Pauline en Gitta (die we spijtig genoeg aan Gent hebben moeten afgeven) voor het helpen bij examens, samen studeren in de bibliotheek en altijd klaar te staan met een mopje om de sfeer te verlichten en elkaar te steunen wanneer stress onvermijdelijk de kop eens opstak.

Als laatste wil ik ook mijn lief bedanken, zonder hem had deze periode er ongetwijfeld heel wat grijzer uitgezien.

Inhoudsopgave

Inleiding

De neiging van niet-evenwichtssystemen om doorheen de tijd te evolueren naar thermisch evenwicht, ook wel thermalisatie genoemd, is een welbekend concept binnen de klassieke statistische mechanica. Op kwantumniveau stelt men zich echter nog heel wat vragen over de mechanismen en relevante tijdschalen die betrokken zijn bij dit fenomeen. Het onderzoek naar thermalisatie in kwantumsystemen kent al jaren een enorme interesse, mede te danken aan de mogelijkheid om theoretische resultaten experimenteel af te toetsen aan de hand van ultrakoude gassen. Een belangrijke rol in de context van thermalisatie wordt gespeeld door de integrabiliteit van het systeem. Integrabiliteit kan over het algemeen gedefinieerd worden als de aanwezigheid van een (groot) aantal operatoren die commuteren met de Hamiltoniaan en elkaar. De bijhorende behouden grootheden verhinderen het ergodisch verkennen van de Hilbertruimte, waardoor integreerbare systemen niet in staat zijn om thermisch evenwicht te bereiken. Onderzoek heeft uitgewezen dat in plaats daarvan een relaxatie naar een veralgemeend evenwicht kan plaatsvinden dat wordt vastgelegd door het veralgemeend Gibbs ensemble [1]. Om thermalisatie toch mogelijk te maken moet men een interactie toevoegen die de integrabiliteit van het systeem breekt.

Het hoofddoel van deze thesis zal eruit bestaan de dynamica te onderzoeken van spinor Bose-Einstein condensaten uit evenwicht gebracht door een kwantum quench. Deze plotse verandering (quench) van het magnetisch veld zorgt ervoor dat de initiële toestand niet langer de grondtoestand is, wat ons toestaat de dynamica van het systeem, dat zich nu in een ver-van-evenwichtstoestand bevindt, te bestuderen tijdens de evolutie naar een nieuw evenwicht. Het spin-1 condensaat dat hier beschouwd wordt is een integreerbaar systeem en bereikt bijgevolg in zijn originele vorm geen thermisch evenwicht. Meer specifiek tracht dit werk theoretisch verder te bouwen op experimenteel onderzoek van Evrard et al. [2] en onderzoek met een theoretische aanpak gebaseerd op Gausissche kwantumtrajecten van Fernandes et al. [3], waarin het integreerbare systeem werd bestudeerd en een indicatie werd gegeven dat thermalisatie inderdaad kon worden bereikt wanneer de integrabiliteit gebroken wordt. In een poging om dit waar te maken wordt een symmetriebrekende term toegevoegd aan de Hamiltoniaan die de integreerbaarheid van het systeem zal opheffen. Vervolgens zijn we geïnteresseerd in hoe de breking van integrabiliteit de dynamica beïnvloed en of deze uiteindelijk tot een relaxatie naar thermisch evenwicht zal leiden.

Opbouw

Het eerste hoofdstuk focust zich op de nodige achtergrond voor deze thesis. Hier worden de basisprincipes van Bose-Einstein condensaten en het zwak interagerend Bose gas uit de doeken gedaan, om vervolgens de stap te zetten naar spinorcondensaten, het systeem van belang voor dit onderzoek. Verder worden enkele belangrijke concepten (kwantum quenches, thermalisatie en integrabiliteit) kort besproken, waarna we ingaan op de verschillende methoden en benaderingen die zullen worden toegepast voor het onderzoeken van de dynamica. Als laatste hebben we het dan ook over het experimenteel artikel waarop dit onderzoek zich baseert.

Hoofdstuk 2 concentreert zich rond de theorie voor het systeem met gebroken integrabiliteit. De Hamiltoniaan wordt opgesteld en de exacte oplossing en benaderingen worden uitgewerkt.

In het derde hoofdstuk worden de resultaten voor het integreerbare systeem uit het artikel van Fernandes et al. [3] gereproduceerd. We bekijken de spin mixing dynamica en hoe deze relaxeert naar een veralgemeende verwachtingswaarde die bepaald wordt uit het veralgemeend Gibbs ensemble, dat de symmetrieën die het systeem integreerbaar maken in rekening neemt.

In het laatste hoofdstuk bereiken we dan het uiteindelijke doel van deze thesis. De symmetriebrekende term die de integrabiliteit van het systeem opheft wordt toegevoegd en de verandering in dynamica die dit met zich meebrengt wordt bestudeerd. Er wordt besproken hoe voor een competitieve bijdrage van de symmetriebrekende term een duidelijke evolutie richting thermisch evenwicht wordt geobserveerd, maar dit nooit exact wordt bereikt. En hoe de restrictie die de grotere Hilbertruimte oplegt op de grootte van de systemen die kunnen worden beschouwd ervoor zorgt dat voor bepaalde systemen revivals opduiken in de dynamica.

1 | Achtergrond

1.1 Bose-Einstein condensaten

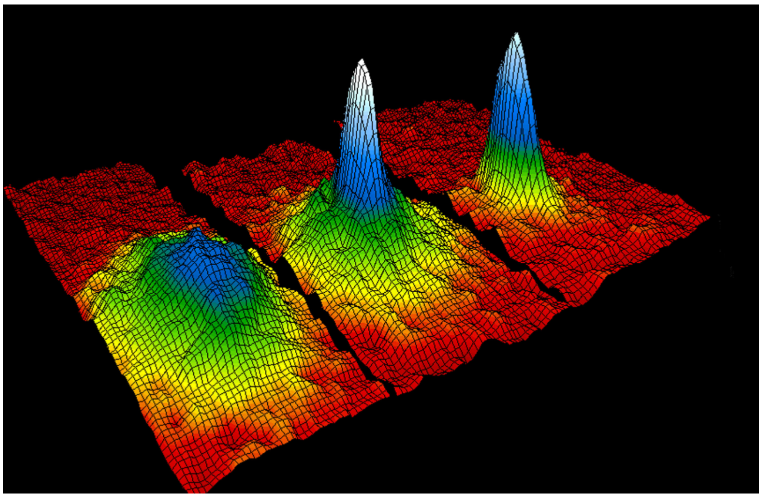
1.1.1 Een drukbezette grondtoestand

Een streepje geschiedenis

Het verhaal van Bose-Einstein condensaten start al in 1925, met een theoretische voorspelling van Einstein. Op basis van een artikel van Bose (1924) over de statistische beschrijving van fotonen [4], voorspelde hij het bestaan van een nieuwe fase in een gas met niet-interagerende atomen. Onder een bepaalde temperatuur zou een deel van de atomen condenseren in de toestand met de laagste energie als gevolg van kwantumstatistische effecten. Iets later in 1938, na de ontdekking van superfluïditeit in vloeibaar helium, had Fritz London een voorgevoel dat er een verband bestond tussen de twee fenomenen [5]. Namelijk dat superfluïditeit een manifestatie zou kunnen zijn van Bose-Einstein condensatie. De daaropvolgende jaren brachten veel theoretisch onderzoek naar het verband tussen BEC (Bose-Einstein condensatie) en superfluïditeit. Belangrijke ontwikkelingen in het veld zijn mede te danken aan Landau en Lifshitz (1951) [6], Penrose (1951) [7], Penrose en Onsager (1956) [8], alsook Onsager (1949) [9] en Feynman (1955) [10] voor de voorspelling van gekwantiseerde vortices en de bijhorende experimenten door Hall en Vinen (1956) [11]. Hoewel superfluïde helium het eerste experimenteel ontdekte BEC is, zijn de interacties tussen helium atomen erg sterk, waardoor het aantal atomen in de laagste energie toestand relatief beperkt is. Als gevolg hiervan ging men op zoek naar zwak interagerende Bose gassen die een hogere fractie atomen in de laagste toestand met zich mee zouden brengen. Een manier om zwakkere interacties te verkrijgen is door de dichtheid te verlagen en te werken met ijle gassen. Het feit dat men dan te maken heeft met ijle atomaire gassen brengt echter wel extra uitdagingen met zich mee. Om in systemen met zo'n lage dichtheid kwantum fenomenen te observeren moet men zich voor de temperatuur reeds in het nanokelvin regime begeven. Experimentele observatie van een zwak interagerend BEC moest bijgevolg nog heel wat langer op zich laten wachten. Pas in 1995 werden Bose-Einstein condensaten voor het eerst experimenteel geobserveerd in ultrakoude ijle atomaire gassen met behulp van nieuwe technieken op basis van magnetische en optische vallen en geavanceerde koeltechnieken [12, 13].

In het kort

Een beetje geschiedenis is altijd leuk, maar we hebben toch ook iets concreter nodig wat zo'n condensaat precies inhoudt. In principe kunnen we het veeldeeltjes systeem beschrijven door middel van een veeldeeltjesgolffunctie $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N; t)$ afhankelijk van de coördinaten $\mathbf{r}_i$ van de deeltjes op tijdstip t. De modulus kwadraat zal net zoals voor een eendeeltjesgolffunctie de betekenis hebben van een waarschijnlijkheidsdichtheid. Nu zal deze echter, in plaats van de waarschijnlijkheid om een deeltje op plaats $\mathbf{r}$ te vinden op tijdstip t, de waarschijnlijkheid geven dat het N-deeltjes systeem zich in een bepaalde configuratie bevindt met elk deeltje op een specifieke plaats $\mathbf{r}_i$. Aangezien we hier te maken hebben met identieke deeltjes, heeft de waarschijnlijkheidsdichtheid ook een zeer belangrijke symmetrie, deze moet namelijk invariant blijven onder het verwisselen van twee



Figuur 1.1: Een van de eerste beelden van een BEC in een ^{87}Rb gas bij een temperatuur van bij benadering 400 nK (links), 200 nK (midden) en 50 nK (rechts) [14] zoals gemeten door [15]. Voor dalende temperatuur ziet men steeds duidelijker de condensatiepiek verschijnen. Beeld door: NIST/JILA/CU-Boulder.

deeltjes. Neem nu bijvoorbeeld twee identieke deeltjes met posities $\mathbf{r} = (r_1, r_2)$, aangezien de twee deeltjes niet onderscheidbaar zijn zou een verwisseling van de twee geen verschil mogen maken in de fysica, met andere woorden:

$$|\psi(r_1, r_2)|^2 = |\psi(r_2, r_1)|^2. \tag{1.1}$$

Na vele fouten in het middelbaar weten we ondertussen dat de wortel nemen van een kwadraat twee oplossingen heeft. Dit betekent dat deze invariantie ons voor de golffunctie twee opties geeft, welke overeen zullen stemmen met twee soorten deeltjes.

$$\psi_B(r_1, r_2) = +\psi_B(r_2, r_1) \rightarrow \text{Bosonen} \tag{1.2}$$

$$\psi_F(r_1, r_2) = -\psi_F(r_2, r_1) \rightarrow \text{Fermionen} \tag{1.3}$$

Fermionen, zoals geweten uit het Pauli exclusieprincipe en we hier kunnen zien door $r_1 = r_2$ te stellen, mogen niet met meerdere tegelijkertijd dezelfde kwantumtoestand bezetten. Het is namelijk niet mogelijk dat $\psi_F(r_1, r_2) = -\psi_F(r_1, r_2)$ tenzij $\psi_F(r_1, r_2) = 0$. Voor eendeeltjes energielevels zal dus wel gestart worden vanaf de grondtoestand, maar zullen in het geval van meerdere deeltjes de hogere energielevels worden opgevuld tot aan het Fermi level E_F. Bosonen hebben hier geen last van en kunnen zonder probleem met meerdere deeltjes tegelijk de laagste energie toestand, of eender welke energietoestand, bezetten. Een Bose-Einstein condensaat, wat overeenkomt met een macroscopisch aantal deeltjes dat dezelfde eendeeltjestoestand bezet, is dan in zijn eenvoudigste vorm niets anders dan het systeem dat naar een minimale energie streeft [16]. Natuurlijk komt er iets meer bij kijken, maar deze redenering geeft al een eerste inzicht in hoe dit mogelijk is (en waarom het een *Bose* en geen Fermi condensaat is).

Zoals hierboven al kort vermeld, wordt een Bose-Einstein condensaat gevormd wanneer een macroscopisch aantal deeltjes zich in de laagste energietoestand bevinden. Dit is een gevolg van het feit dat er een limiet is voor het aantal deeltjes dat geëxciteerde toestanden kan bezetten N_{exc}, terwijl dit voor de laagste energietoestand niet het geval is. Het totaal aantal deeltjes wordt zo opgesplitst in het aantal deeltjes dat zich in de laagste energietoestand ϵ_{min} bevindt (N_0) en het aantal deeltjes dat zich in geëxciteerde toestanden bevinden (N_{exc}),

$$N = N_0 + N_{exc}^{max} = n(\epsilon_{min}) + \sum_{\epsilon \neq \epsilon_{min}} n(\epsilon). \quad (1.4)$$

Voor N_{exc} kan de overgang gemaakt worden van een sommatie naar een integraal [1]:

$$N_{exc} = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon. \quad (1.5)$$

Waarbij $f(\epsilon)$ de Bose-Einstein distributie voorstelt die de bezetting van de eendeeltjestoestanden geeft en $g(\epsilon)$ de toestandsdichtheid is. Uit de uitdrukking voor $f(\epsilon)$,

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{(\epsilon - \mu)}{k_B T}} - 1}, \quad (1.6)$$

weten we dat de bezetting en dus ook N_{exc} stijgt wanneer de chemische potentiaal μ omhoog gaat. Deze mag echter niet groter worden dan $\mu = \epsilon_{min} = 0$ aangezien dit negatieve bezettingen mogelijk zou maken, wat niet fysisch is. Dit houdt in dat bovenstaande integraal steeds convergeert naar een eindige waarde voor de bezetting van de geëxiteerde energietoestanden voor $\mu \to \epsilon_{min}$. Het maximum voor N_{exc} wordt dus bekomen door $\mu = 0$ te stellen in de Bose-Einstein distributie:

$$N_{exc}^{max}(T) = \int_0^\infty g(\epsilon) \frac{1}{e^{\frac{(\epsilon)}{k_B T}} - 1} d\epsilon. \quad (1.7)$$

We merken op dat voor dalende termperatuur ook N_{exc}^{max} steeds kleiner wordt zodat uiteindelijk een punt bereikt wordt waar het totale aantal deeltjes net overeenkomt met de capaciteit van de geëxciteerde toestanden $N = N_{exc}^{max}(T_c)$. De temperatuur waarbij dit gebeurt is de kritieke temperatuur T_c. Onder de kritieke temperatuur zullen de geëxciteerde toestanden gevuld worden tot hun maximaal mogelijke bezetting (N_{exc}^{max} deeltjes), de overige $N_0 = N - N_{exc}^{max}(T)$ deeltjes kunnen nergens anders heen dan naar de grondtoestand met energie ϵ_{min}. Hierin kunnen altijd alle overtollige deeltjes geplaatst worden. Een blik op de uitdrukking hierboven toont namelijk dat wanneer μ naar ϵ_{min} neigt, de bezetting naar oneindig gaat. Als het verschil tussen N_{exc}^{max} en het totaal aantal deeltjes N groot is, zal de laagste toestand macroscopisch bezet worden en vormt er zich een condensaat [17].

Deze korte uiteenzetting doet dit fenomeen en het bijhorende onderzoeksveld ongetwijfeld tekort, voor meer informatie wordt daarom verwezen naar [12, 13, 17, 18].

1.1.2 Ultrakoude gassen

Ultrakoude gassen vormen een interessant platform voor het bestuderen van kwantum fenomenen door de enorme controle die deze systemen bieden over experimentele parameters.
Een groot voordeel van deze systemen is dat de parameters in de Hamiltoniaan op gecontoleerde wijze experimenteel aangepast kunnen worden door middel van laserstralen en magnetische velden. In het bijzonder kunnen de interacties worden ingesteld met behulp van Feshbach resonanties. Deze staan toe om via een magnetisch veld de interactiesterkte tussen atomen af te stemmen, wat reeds tot meerdere grote doorbraken binnen verscheidene velden van de fysica heeft geleid [19].
Een ander voordeel is dat er als gevolg van de lage dichtheid met 'microscopische' lengteschalen wordt gewerkt die groot genoeg zijn om de structuur van de condensaat golffunctie optisch waar te nemen [13]. De vorming van Bose-Einstein condensatie voor gassen die gekoeld worden tot

[1] Er werd hier de keuze gemaakt om het nulpunt van de energie bij ϵ_{min} te nemen, waardoor de ondergrens van de integraal hier dus 0 is. Dit lijkt de laagste energietoestand mee te nemen terwijl de sommatie over $\epsilon \neq \epsilon_{min}$ loopt. De benadering die gemaakt wordt bij de overgang van sommatie naar integraal neemt echter de laagste energie niet mee in rekening ($g(\epsilon \to 0) = 0$). Een infinitesimaale positive waarde δ had evengoed gewerkt als ondergrens.

onder hun kritische temperatuur zorgt ervoor dat de kwantumeffecten die zich typisch voordoen op atomaire schaal nu waarneembaar worden op niveau van het volledige fluïdum.

Hoewel ultrakoude atomaire gassen natuurlijk artificiële systemen zijn die niet spontaan in de natuur voorkomen, vormen deze wel een soort analogon die ons toestaat systemen die in hun natuurlijke vorm dit niet toestaan, te bestuderen. De grote afstembaarheid en experimentele toegang van kwantumfluïda zorgt ervoor dat deze reeds sinds lang voor de realisatie van ultrakoude atomaire gassen een sterke interesse kennen als kwantum simulatoren [16, 20, 21].

1.1.3 Het zwak interagerend Bose gas

Een volgende stap is de introductie van het zwak interagerend Bose gas vanuit tweede kwantisatie. Aangezien we hier werken met een veeldeeltjes systeem wordt de Hilbertruimte $\mathcal{H}_1$, die alle mogelijke toestanden voor één deeltje beschrijft, veralgemeend naar de Fock ruimte $\mathcal{H}_F = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_N \oplus \ldots$. De veeldeeltjes basis wordt gevormd door het direct product van alle eigentoestanden, gelabeld door de bezetting:

$$|n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \ldots, n_{\mathbf{k}_N}, \ldots\rangle = \prod_{\mathbf{k}_i} |n_{\mathbf{k}_i}\rangle\,, \tag{1.8}$$

met $n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{n_{\mathbf{k}}}}(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}})^{n_{\mathbf{k}}}\,|0\rangle$ de eigentoestanden, waarbij we ons herinneren dat de creatie- en annihilatie-operatoren $\hat{a}^\dagger_k$ en $\hat{a}_k$ toestanden omzetten van N deeltjes naar N $\pm$ 1 deeltjes zodat vanuit de vacuumtoestand elke andere toestand geconstrueerd kan worden door deze operaton meerdere malen toe te passen. De symmetrie voorwaarde van de toestanden wordt gegeven door de bosonische commutatierelaties,

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}_i}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_j}] = \delta_{\mathbf{k}_i,\mathbf{k}_j}\,, \qquad\qquad [\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_i}, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_j}] = 0. \tag{1.9}$$

Naast de creatie- en annihilatie-operatoren kan ook een veldoperator $\psi(\mathbf{r})$ gedefinieerd worden met als verband tussen de twee operatoren

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \qquad\qquad \hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\int dr \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{1.10}$$

De eerste operator annihileert een boson op coördinaat $\mathbf{r}$ en voldoet met zijn geconjugeerde operator $\psi(\mathbf{r})^\dagger$, die een boson creëert op coördinaat $\mathbf{r}$, aan volgende commutatierelatie:

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \qquad\qquad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = 0. \tag{1.11}$$

Nu de basis en de veldoperatoren met hun bijhorende commutatierelaties ingevoerd zijn kunnen we ook de Hamiltoniaan in tweede kwantisatie beschouwen.
Voor de interactieterm van de Hamiltoniaan geeft dit [2] [12]:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger \hat{\psi}(\mathbf{r}) V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}(\mathbf{r}')^\dagger \hat{\psi}(\mathbf{r}'). \tag{1.12}$$

Het feit dat hier de aanname kan worden gemaakt dat we met ijle gassen te maken hebben heeft enkele gevolgen voor de potentiaal $V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. De aanname van de ijlheid van het gas, drukt zich voor dit soort systemen namelijk uit als

$$r_0 \ll d, \tag{1.13}$$

[2] Voor een uitgebreide afleiding wordt verwezen naar [22].

waarbij r_0 de dracht van de interatomaire potentiaal is en d de gemiddelde afstand tussen atomen. Door deze eigenschap kan aangenomen worden dat interacties beperkt zijn tot botsingen tussen slechts twee deeltjes ($\mathbf{r}_i$ en $\mathbf{r}_j$) via een vereenvoudigde contactpotentiaal $V_i(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Daarnaast is de afstand tussen de deeltjes groot genoeg dat kan worden aangenomen dat alle eigenschappen van het systeem beschreven kunnen worden door de verstrooiingsamplitude. Bij lage temperaturen wordt de golffunctie gedomineerd door de bijdrage voor angulair moment gelijk aan nul, zodat interacties plaatsvinden via s-golf verstrooiing. Bijgevolg verwacht men slechts een enkele parameter die de effecten van de interactie karakteriseert, de s-golf verstrooiingslengte a_s. Wanneer $|a_s| \ll d$ wordt het gas zwak interagerend genoemd [12]. De interactieconstante g wordt gegeven door

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \tag{1.14}$$

Voor de kinetische term heeft men de standaard $\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}$ operator, zodat de Hamiltoniaan uiteindelijk volgende vorm krijgt:

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \left[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \right] \tag{1.15}$$

met $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ de bosonische veldoperator die het gas beschrijft, m de massa van de atomen en $V_0(\mathbf{r})$ de externe potentiaal [3].

De dynamica wordt beschreven door de Heisenberg bewegingsvergelijking

$$i\hbar\partial_t \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t) = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t), \hat{H}] \tag{1.16}$$

die in dit geval volgende uitdrukking oplevert:

$$i\hbar\partial_t \hat{\psi}(\mathbf{r},t) = \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r},t) + \frac{g}{2}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}(\mathbf{r},t) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r},t). \tag{1.17}$$

Dit soort Bose gas kan ook uitgebreid worden naar meerdere componenten om verschillende soorten deeltjes voor te stellen, dit is het onderwerp van de volgende sectie over *spinorcondensaten.*

Het Penrose-Onsager criterium en de ordeparameter

Nu het zwak interagerend gas beschouwd wordt, is de Hamiltoniaan niet meer simpelweg een som van eendeeltjes Hamiltonianen maar krijgen we ook te maken met de term die de interactie tussen twee deeltjes uitdrukt. Het zal nodig zijn om van het beeld van eendeeltjestoestanden af te stappen en ons te richten tot dichtheidsmatrices om het interagerende systeem te beschrijven,

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| \Leftrightarrow \rho(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N,\mathbf{r}'_1,\ldots,\mathbf{r}'_N) = \Psi^*(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)\Psi(\mathbf{r}'_1,\ldots,\mathbf{r}'_N). \tag{1.18}$$

Net zoals de veeldeeltjesgolffunctie $\Psi(\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N)$ zal de veeldeeltjes dichtheidsmatrix ook alle nodige informatie over het systeem bevatten. Het is echter vaak zo dat we niet alle informatie nodig hebben die de volledige dichtheidsmatrix bevat, als we geïnteresseerd zijn in de verwachtingswaarde van een observabele die maar op één deeltje inwerkt bijvoorbeeld, en in plaats daarvan kunnen werken met een gereduceerde dichtheidsmatrix door enkele van de variabelen uit te integreren. Voor één deeltje krijgt men bijvoorbeeld het volgende:

$$\rho_1(\mathbf{r};\mathbf{r}') = N\int d\mathbf{r}_2...d\mathbf{r}_N, \rho(\mathbf{r},\mathbf{r}_2,...,\mathbf{r}_N;\mathbf{r}',\mathbf{r}'_2,...,\mathbf{r}'_N) \tag{1.19}$$

[3]Het uitdrukken van de andere twee termen in tweede kwantisatie kan analoog aan de tweedeeltjes-interactieterm gebeuren, enkel is er dan slechts één deeltjesdichtheidsoperator nodig.

waarbij het spoor wordt genomen over alle positievariabelen behalve één. Deze kan ook geschreven worden in termen van de veldoperatoren $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ en $\hat{\psi}(\mathbf{r})$,

$$\rho_1(\mathbf{r};\mathbf{r}') = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\rangle, \tag{1.20}$$

en is in deze vorm ineens te linken aan de deeltjesdichtheid van hierboven. Daarnaast is de gereduceerde dichtheidsmatrix een hermitische (en lineaire) operator $\rho_1^*(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho_1(\mathbf{r},\mathbf{r}')$. Het spectraal decompositie theorema zegt dat elke hermitische lineaire operator geschreven kan worden in een decompositie van zijn orthonormale eigenfuncties en reële eigenwaarden als volgt:

$$\rho_1(\mathbf{r};\mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l \phi_l^*(\mathbf{r})\phi_l^*(\mathbf{r}'). \tag{1.21}$$

Dit brengt ons bij een nu veralgemeend criterium voor Bose-Einstein condensatie: het Penrose-Onsager criterium. Dit zegt dat Bose-Einstein condensatie zich voordoet als en slechts als de eendeeltjes gereduceerde dichtheismatrix een eigenwaarde λ_0 heeft van orde N. Uit bovenstaande uitdrukking wordt dan ook de ordeparameter $\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\lambda_0}\phi(\mathbf{r})$ gedefinieerd. De ordeparameter geeft aan wanneer de fasetransitie van de normale fase naar de Bose-Einstein gecondenseerde fase plaatsvindt door de eigenwaarde te interpreteren als het aantal deeltjes dat zich in het condensaat bevindt ($\lambda_0 = N_0$). Op deze manier wordt $\Psi(\mathbf{r})$ nagenoeg 0 in de normale fase en macroscoposich groot in de Bose-Einstein gecondenseerde fase. De ordeparameter wordt ook wel de 'macroscopische golffunctie' genoemd omdat dit een golffunctie is die afhankelijk is van een enkele positievariabele maar wel het globale gedrag van het systeem beschrijft [17].

1.2 Spinorcondensaten

Het zwak interagerend Bose gas kan worden uitgebreid om meerdere componenten $\hat{\psi}_m(\mathbf{r},t)$ te bevatten die onderling interageren. Deze verschillende componenten onderscheiden zich van elkaar op basis van hun hyperfijnstructuur. De atomen van het Bose gas bezitten namelijk naast hun momentum, dat uitgewisseld wordt via paarsgewijze interactie, nog andere interne vrijheidsgraden als gevolg van de structuur van de atoomkern en de elektronenwolk. Ook al kunnen deze details over de structuur van het atoom vaak verwaarloosd worden [23], speelt de interne vrijheidsgraad van de hyperfijnstructuur die afstamt van de interactie tussen de atoomkern en de elektronenwolk wel nog een rol.

De motivatie voor deze uitbreiding vind zijn oorsprong in alkali atomen, waar de levels in de hyperfijnstructuur, in overeenstemming met de optellingsregels voor angulair momentum, gegeven worden door $F = I \pm S$ met I de spin van de atoomkern en S steeds gelijk aan 1/2 is aangezien alkali atomen slechts één valentie-elektron beschikbaar hebben voor interactie. Voorbeelden zijn ^{87}Rb, ^{23}Na, ^{7}Li en ^{41}K, deze alkalimetalen worden gebruikt voor ultrakoude fluïda, hun atoomkern spin is I=3/2 zodat de hyperfijn vrijheidsgraad twee levels F=1 en F=2 oplevert.

Voor het systeem dat bestudeerd wordt in deze thesis stemt de interne vrijheidsgraad m overeen met de spin van het beschouwde deeltje. Specifiek voor een spin 1 condensaat heeft men dan drie componenten en ziet het nieuwe vectoriële veld er als volgt uit:

$$\hat{\mathbf{\Psi}}(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_{+1}(\mathbf{r},t) \\ \hat{\psi}_{0}(\mathbf{r},t) \\ \hat{\psi}_{-1}(\mathbf{r},t) \end{pmatrix}. \tag{1.22}$$

Net zoals voor het scalaire veld kan dit soort systeem ook een Bose-Einstein condensaat vormen, wat aanleiding geeft tot een nu vectoriële ordeparameter. De dynamica van deze ordeparameter wordt beschreven door spin operatoren, wat gezien kan worden als de toestandsvector $\hat{\psi}$ die roteert in de spin ruimte, waarbij de waarden van de componenten overeenstemmen met gekwantiseerde levels na projectie op een hoofdas. Bij een rotatie in de projectie basis gaan atomen van de ene component naar de andere, een belangrijke eigenschap van spinorcondensaten, en een die nog zeer vaak zal terugkomen doorheen deze thesis, *spin mixing*.

1.2.1 Hamiltoniaan

Het niet-interagerende deel van de Hamiltoniaan $\hat{H}_0$ bestaat, naast de standaard kinetische term en valpotentiaal $V_0(\mathbf{r})$, ook uit een lineaire en kwadratische Zeeman term. Deze Zeeman termen zijn afkomstig van een koppeling met een zwak extern magnetisch veld waardoor de ontaarding van de hyperfijnstructuur wordt opgeheven. De storing door het magnetisch veld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, aangelegd in de z-richting, zorgt er namelijk voor dat de energielevels van de $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}} = -1, 0, +1\rangle$ subtoestanden verschoven worden met $\Delta E^{(1)}_{m_{\mathcal{F}}} \propto \mu m_{\mathcal{F}} B$, met $\mu > 0$ het atomair magnetisch moment en $m_{\mathcal{F}}$ de projectie van het intern angulair moment $\mathcal{F}$ langs de z-as. Dit wordt ook wel het lineair *hyperfijn* Zeeman effect genoemd, niet te verwarren met het *normale* Zeeman effect dat een vergelijkbare energieverschuiving veroorzaakt in de orbitale elektronen levels onder invloed van een extern magneetveld. Deze term zorgt echter enkel voor een constante rotatie van de spincomponenten, waardoor deze kan worden weggetransformeerd in de definitie van de veldoperatoren en uiteindelijk niet bijdraagt aan de dynamica[4].

Daarnaast heeft de Hamiltoniaan ook een bijdrage van het kwadratisch Zeeman effect als gevolg van tweede orde interacties tussen het totaal angulair moment F en het magnetisch veld, de energielevels worden ook hierdoor verschoven, ditmaal volgens $\Delta E^{(2)}_{m_{\mathcal{F}}} \propto \mu m^2_{\mathcal{F}} B^2$. In tegenstelling tot voor het lineaire Zeemaneffect is de kwadratische Zeemanenergie geen behouden grootheid. Dit zorgt ervoor dat de dynamica wel beïnvloed wordt door de energieverschuiving afkomstig van deze term en maakt het de hoofdparameter voor externe manipulatie van experimenten.

Het niet-interagerende deel van de Hamiltoniaan ziet er uiteindelijk als volgt uit [16]:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \int d\mathbf{r} \hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(\mathbf{r}) \big(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + p f_z + q f_z^2 \big) \hat{\Psi}, \tag{1.23}$$

met f_z de z-component van de spin-1 matrices $\mathbf{f} = (f_x, f_y, f_z)^T$,

$$f^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad f^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad f^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.24}$$

Deze stemt overeen met een van de negen basisoperatoren die geassocieerd worden met het spin-1 deeltje, alle operatoren samen vormen een 3×3 dichtheidsmatrix die het spin-1 deeltje karakteriseren op eendeeltjesniveau [24].

Het interactiedeel van de Hamiltoniaan beschrijft bi-atomaire botsingen waarbij door uitwisseling van intern angulair moment spin mixing kan plaatsvinden, de overgang van één component van het veld naar een andere. Zo'n botsing tussen twee deeltjes met toestanden $|\mathcal{F}, m^1_{\mathcal{F}}\rangle$ en $|\mathcal{F}, m^2_{\mathcal{F}}\rangle$ kan uitgedrukt worden in een twee-deeltjes toestand $|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle$, met $\mathcal{F}$ het totale angulair moment

[4]Voor de volledigheid wordt deze in deze sectie nog opgenomen in de Hamiltoniaan (1.23 en 1.33), maar zal verder niet in rekening worden genomen.

en $m_{\mathcal{F}} = m^1_{\mathcal{F}} + m^2_{\mathcal{F}}$ de projectie langs de z-as. Deze blijven beide behouden bij een botsing, ook al kan het intern angulair moment van de individuele deeltjes wel veranderen. Hierdoor kan voor de verdere opbouw van de Hamiltoniaan gebruik gemaakt worden van de projectie-operatoren

$$\hat{P}_{\mathcal{F}} = \sum_{m_{\mathcal{F}}=-1}^{1} |\mathcal{F}\rangle\, , m_{\mathcal{F}}|\mathcal{F}, m_{\mathcal{F}}\rangle. \tag{1.25}$$

In het geval van een spin-1 condensaat kan het totaal intern angulair moment $\mathcal{F}$ de waarden 0, 1 en 2 aannemen. Dit angulair moment zorgt in de uitdrukking voor de golffunctie echter voor een factor $(-1)^{2F} = 1$. Aangezien deze factor onder uitwisseling van twee bosonen het teken van de golffunctie niet mag veranderen, is de interactie beperkt tot slechts twee kanalen ($\mathcal{F} = 0$ en $\mathcal{F} = 2$). Door de ijlheid van het gas kunnen de interacties opnieuw beschouwd worden als contactinteracties met de interactiesterkte gedefinieerd als

$$g_{\mathcal{F}} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\mathcal{F}}}{m} \tag{1.26}$$

met $a_{\mathcal{F}}$ de s-golf verstrooiingslengte. De contactpotentiaal voor de twee interactiekanalen ziet er dan uit als

$$\hat{V}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \big[g_0\hat{P}_0 + g_2\hat{P}_2\big]\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{1.27}$$

De projectie-operatoren kunnen weggewerkt worden door gebruik te maken van enkele operator-relaties. Via de compleetheidsrelatie $\hat{P}_0 + \hat{P}_2 = \hat{1}$ en de identiteit $\hat{\mathbf{F}}^{(1)} \cdot \hat{\mathbf{F}}^{(1)} = \lambda_0\hat{P}_0 + \lambda_2\hat{P}_2$, met $\hat{\mathbf{F}}$ de eendeeltjes spin operator en $\lambda_{\mathcal{F}} = 1/2[\mathcal{F}(\mathcal{F}+1) - 2F(F+1)]$, kunnen $\hat{P}_0$ en $\hat{P}_2$ uitgedrukt worden als

$$\begin{cases} \hat{P}_0 = \frac{1-\hat{\mathbf{F}}^1\cdot\hat{\mathbf{F}}^2}{3} \\ \hat{P}_2 = \frac{2+\hat{\mathbf{F}}^1\cdot\hat{\mathbf{F}}^2}{3}. \end{cases} \tag{1.28}$$

Dit staat toe om de potentiaal te herschrijven in volgende vorm:

$$\hat{V}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{3}\big[(g_0 + 2g_2) + (g_2 - g_0)\hat{\mathbf{F}}^1 \cdot \hat{\mathbf{F}}^2\big]\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{1.29}$$

De interactieterm van de Hamiltoniaan ziet er dan uit als

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}'\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}')\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{V}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\hat{\Psi}(\mathbf{r}')\hat{\Psi}(\mathbf{r}) \tag{1.30}$$

$$= \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\big[(g_0 + 2g_2) + (g_2 - g_0)\hat{\mathbf{F}}^1 \cdot \hat{\mathbf{F}}^2\big]\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \tag{1.31}$$

met een spin-onafhankelijke (dichtheids)interactie en een spin-afhankelijke interactie gelinkt aan de eendeeltjes spin operator $\hat{\mathbf{F}}$. Door gebruikt te maken van de dichtheidsoperator $\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ en de lokale spin-1 operator $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\mathbf{f}\hat{\Psi}(\mathbf{r})$, met $\mathbf{f}$ de vector van spin-1 matrices uit de vorige sectie, kan de uitdrukking nogmaals herschreven worden,

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\big(c_0\hat{n}^2 + c_2\hat{\mathbf{F}}^2\big). \tag{1.32}$$

Waarbij ook de interactiesterktes herschreven werden tot $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ en $c_2 = (g_2 - g_0)/3$.

De volledige Hamiltoniaan van het spin-1 condensaat is dan [16, 23–25]

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d\mathbf{r}\big[\hat{\Psi}^\dagger\big(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + pf_z + qf_z^2\big)\hat{\Psi} + \frac{1}{2}\big(c_0\hat{n}^2 + c_2\hat{\mathbf{F}}^2\big)\big]. \tag{1.33}$$

1.3 Kwantum quenches, Thermalisatie en Integrabiliteit

Zoals hierboven al vermeld werd is het systeem dat behandeld wordt doorheen deze thesis een spinor-1 condensaat. Dit systeem staat toe heel wat verschillende scenario's voor dynamica na de quench, wat anders meerdere (experimentele) platformen zou vereisen, zowel theoretisch als experimenteel te bestuderen door het variëren van enkele parameters [2]. Een van de mogelijke scenario's die belangrijk is voor deze thesis, is dat door middel van spin mixing meerdere (drie) eendeeltjestoestanden elk macroscopisch bezet kunnen worden, wat tot een gefragmenteerd condensaat leidt. Zoals we verder zullen zien zijn echter ook andere scenario's mogelijk, zoals bijvoorbeeld het optreden van persistente spin-oscillaties als gevolg van de precessie van het magnetisch veld. Het bestuderen van deze dynamica wordt mogelijk gemaakt door een plotse quench van het magnetisch veld, wat een verandering van de grondtoestand teweegbrengt die het systeem wegdrijft van zijn evenwicht en toestaat de nieuwe niet-evenwichtsdynamica van het systeem te bestuderen terwijl het evolueert naar de nieuwe evenwichtstoestand. Het is echter niet gegarandeerd dat deze nieuwe evenwichtstoestand zal overeenkomen met het verwachte thermisch evenwicht, dit kan namelijk verhindert worden door behouden grootheden die het systeem uit evenwicht houden. In zo'n gevallen kan in plaats daarvan een veralgemeend evenwicht bereikt worden dat bijvoorbeeld wordt vastgelegd door een Gibbs ensemble dat deze behouden grootheden in rekening neemt. Specifiek voor dit systeem wordt het gas initieel geprepareerd in de Fock toestand $|0, N, 0\rangle$, de grondtoestand van het systeem voor gevallen waarin de systeemparameter $q/U \to \infty$. Vervolgens wordt de Zeeman splitting parameter plots gequencht naar een veel kleinere, eindige waarde waarvoor de grondtoestand een eindige bezetting van alle drie de spintoestanden heeft. Deze quench zal de Hamiltoniaan van het systeem echter plots veranderen $\hat{\mathcal{H}} \to \hat{\mathcal{H}}'$ waardoor de initiële toestand niet langer de grondtoestand is en het systeem, nu in een ver-van-evenwichtstoestand, zal evolueren op zoek naar een nieuw evenwicht.

Kwantum quenches zijn een van de eenvoudigste manieren om de niet-evenwichtsdynamica van gesloten interagerende kwantumsystemen te bestuderen [26] en staan toe om zowel de oude als nieuwe Hamiltoniaan nauwkeurig te kiezen, waardoor een brede variëteit aan niet-evenwichtsdynamica kan worden waargenomen.

Een belangrijk aspect wanneer het aankomt op de niet-evenwichtsdynamica van dit soort systemen is hun integrabiliteit. Hoewel de definitie van kwantumintegrabiliteit nog een onderwerp van debat kan zijn, wordt dit standaard gedefinieerd als de aanwezigheid van een (extensief) aantal lokale operatoren of meer bepaald operatoren die een som zijn van een groot aantal lokale operatoren die commuteren met de Hamiltoniaan en met elkaar [27]. Een fundamentele aanname binnen de statistische mechanica is dat gesloten systemen met een groot aantal vrijheidsgraden thermisch evenwicht bereiken doordat ze de faseruimte ergodisch samplen[5]. Deze aanname wordt echter ongeldig wanneer de systemen integreerbaar zijn, aangezien de behouden grootheden die corresponderen met de operatoren die commuteren met de Hamiltoniaan voorkomen dat het systeem zijn volledige Hilbertruimte verkent. Eerder werden al enkele complexe systemen bestudeerd waarvan verwacht werd dat deze niet zouden thermaliseren door hun integreerbare dynamica, het eerste experimentele bewijs kwam in 2006 met een experiment van Kinoshita et al., waarin een studie van niet-evenwichtsdynamica van 1D bijna integreerbare Bose gassen aantoonde dat deze systemen inderdaad niet thermaliseren [29].

Hoewel experimenten aantonen dat ergodiciteit en de bijhorende thermalisatie zeker niet gegarandeerd zijn, is het wel mogelijk om de verwachtingswaarden van observabelen te voorspellen voor een 'veralgemeend' evenwicht in de vorm van een asymptotische toestand door de integrabiliteit, of

[5] Hoewel ergodiciteit in de kwantum wereld ingewikkelder ligt en een concrete definitie nog niet volledig afgebakend is, kan dit hier zelfs als een synoniem worden genomen voor thermalisatie [28].

meer specifiek de bijhorende constanten van beweging, in rekening te brengen. Dit wordt gedaan met behulp van een veralgemeend Gibbs ensemble (GGE). De bijhorende dichtheidsmatrix ziet er als volgt uit:

$$\hat{\rho}_{GGE} = Z^{-1}\exp\big(-\sum_{\alpha}\lambda_\alpha I_\alpha\big), \tag{1.34}$$

waarbij $Z = \mathrm{Tr}[\exp\big(-\sum_\alpha \lambda_\alpha I_\alpha\big)]$ de toestandssom is, λ_α Lagrange-multiplicatoren zijn en I_α de constanten van beweging uitdrukken. Deze zou dan een correcte voorspelling moeten geven voor de observabelen na relaxatie. Ook integreerbare systemen kunnen dus relaxeren naar een soort evenwichtstoestand waarvan de eigenschappen vastgelegd zijn door de algemene statistische fysica zolang de dichtheidsmatrix wordt aangepast om de bijkomende behouden grootheden in rekening te brengen. Voor systemen waarbij de enige behouden grootheden de totale energie en het aantal deeltjes zijn, reduceert het ensemble zich tot het groot-canonisch ensemble [1].
Wanneer de integrabiliteit gebroken wordt met een voldoende sterke storing verwacht men dat ergodisch gedrag opnieuw zal optreden en het systeem bijgevolg zou kunnen thermaliseren. Het vinden van de nodige voorwaarden voor thermalisatie vormt echter een belangrijke vraag binnen verschillende velden, van wiskundige en statistiche fysica tot kwantum chaos. Voor kwantumsystemen is hier nog geen duidelijk uitsluitsel over maar lijkt het antwoord op het begrijpen van kwantum thermalisatie zich momenteel te verschuilen in chaotisch gedrag via de 'eigenstate thermalization hypothesis (ETH)'[26].

Het veld van kwantum quenches, thermalisatie en integrabiliteit en de verbanden tussen de drie is natuurlijk veel rijker dan de korte inleiding die hier gegeven wordt, welke zich puur beperkt tot enkele van de concepten relevant voor deze thesis. Daarom wordt de geïnteresseerde lezer doorverwezen naar [1, 26, 27] en specifiek voor de ETH naar [27, 30–32].

1.4 Methoden

In deze sectie worden de verschillende methoden en benaderingen die gebruikt zullen worden om de dynamica van het spinorcondensaat te bestuderen uit de doeken gedaan.

1.4.1 Gemiddeld veld theorie: de Gross-Pitaevskii vergelijking

Een eerste laagste-orde benadering is het vervangen van de kwantumveldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ door zijn klassieke verwachtingswaarde $\psi(\mathbf{r},t) = \langle\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\rangle$ in de Heisenberg bewegingsvergelijking (1.17). Deze overgang van kwantum naar klassieke beschrijving is toegestaan door het grote aantal atomen dat zich in dezelfde toestand bevindt bij zeer lage temperatuur (Bose-Einstein condensaat). Zoals hierboven vermeld werd bij het invoeren van de ordeparameter geldt bij macroscopische bezetting van de laagste energietoestand dat $\lambda_0 = N_0 \approx N$. Bijgevolg kan aangenomen worden dat alle andere eigenwaarden verwaarloosbaar klein zullen zijn waardoor

$$\rho_1(\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}'). \tag{1.35}$$

Overige termen zullen het gevolg zijn van (thermische) fluctuaties, deze verdwijnen echter voor $T \to 0$ en kunnen hier achterwege gelaten worden. Het feit dat we met een BEC te maken hebben zorgt er dus voor dat,

$$\rho_1(\mathbf{r};\mathbf{r}') = \langle\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\rangle \approx \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}') \tag{1.36}$$

mag worden aangenomen [17]. In dat geval speelt de niet-commutativiteit van de veldoperatoren $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ geen rol meer en kan het veld vervangen worden door een klassieke functie $\psi(\mathbf{r},t)$ [12]. De Heisenberg bewegingsvergelijking wordt op deze manier gereduceerd tot de Gross-Pitaevskii vergelijking:

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \left(\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) + g\big|\psi(\mathbf{r},t)\big|^2\right)\psi(\mathbf{r},t). \tag{1.37}$$

Meer algemeen kan deze methode gezien worden als de laagste orde benadering van de expansie van de veldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ in zijn verwachtingswaarde plus fluctuaties.

$$\hat{\psi}(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r},t) + \delta\hat{\psi}(\mathbf{r},t) \tag{1.38}$$

Deze expansie van het veld werd geïntroduceerd door Bogoliubov [33] in zijn beschrijving van vloeibaar Helium. Voor een kwantumgas is de invloed van interacties en fluctuaties echter minder sterk voor temperaturen onder de kritieke en verkrijgt men al een goede benadering voor de energie door de fluctuaties te verwaarlozen en te werken met de klassieke verwachtingswaarde [17]. Aangezien deze methode fluctuaties niet in rekening neemt, wordt dit ook wel de gemiddeld veld theorie van het zwak interagerend Bose gas genoemd. De Gross-Pitaevskii vergelijking kende zijn introductie in de studie van gekwantiseerde vortices [34, 35], maar heeft zich ondertussen ontwikkeld tot een van de grote steunpilaren binnen de studie van zwak interagerende Bose gassen.

1.4.2 Bogoliubov Theorie

Gross-Pitaevskii-Bogoliubov Hamiltoniaan

Een kleine stap verder dan de Gross-Pitaevskii vergelijking is de Bogoliubov benadering, waarin kleine kwantumfluctuaties in rekening worden gebracht. De veldoperator $\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ wordt in dit geval vervangen door de expansie uit (1.38) waarbij een storing $\delta\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ is toegevoegd aan de klassieke verwachtingswaarde. Dit staat toe een benaderende kwadratische Hamiltoniaan te bepalen voor de elementaire excitaties van het zwak interagerend gas, resulterend in gelineariseerde dynamica. De fluctuatie-operatoren worden logischerwijs beschouwd als klein zodat de bekomen Hamiltoniaan kan worden geëxpandeerd tot op tweede orde in $\delta\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$ en $\delta\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)$. Deze Hamiltoniaan wordt de Gross-Pitaevskii-Bogoliubov Hamiltoniaan genoemd. Aan de hand van de bosonische commutatierelaties voor de veld operatoren kunnen vervolgens de Heisenberg bewegingsvergelijkingen voor de fluctuatie-operatoren afgeleid worden [17],

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \big[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t),\hat{H}\big] = \big(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r})\big)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\big(\frac{g}{2}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t)\big)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r},t). \tag{1.39}$$

Alternatief kunnen dezelfde vergelijkingen rechtstreeks worden afgeleid uit de Gross-Pitaevskii vergelijking door kleine amplitude oscillaties te beschouwen op een stationaire oplossing. De expansie ziet er dan als volgt uit,

$$\psi(\mathbf{r},t) = e^{-i\mu(/\hbar)}[\psi_0(\mathbf{r}) + \delta\psi(\mathbf{r},t)] \tag{1.40}$$

tot op eerste orde in $\delta\psi(\mathbf{r},t)$ en $\delta\psi(\mathbf{r},t)^*$ levert dit,

$$i\hbar\partial\delta\psi = \big(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_0(\mathbf{r}) - \mu\big)\delta\psi + 2g\,^2\,\delta\psi + g\psi_0^2\delta\psi^*. \tag{1.41}$$

Zowel $\delta\psi(\mathbf{r},t)$ als $\delta\psi(\mathbf{r},t)^*$ komen voor in de vergelijking, deze moeten door de linearisatie als onafhankelijke variabelen behandeld worden, zodat men een set gekoppelde lineaire partiële differentiaalvergelijkingen verkrijgt, de Bogoliubov vergelijkingen:

$$i\hbar\partial\begin{pmatrix}\delta\psi\\ \delta\psi^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}H_{GP} + g|\psi_0|^2 - \mu & g\psi_0^2\\ -g\psi_0^{*2} & -H_{GP} - g|\psi_0|^2 + \mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta\psi\\ \delta\psi^*\end{pmatrix}. \tag{1.42}$$

Waarbij H_{GP} de Hamiltoniaan uit de Gross-Pitaevskii vergelijking aanduidt. Deze vergelijkingen kunnen gediagonaliseerd worden om de eigenmodes en het bijhorende excitatiespectrum van het systeem te bepalen. Een vereenvoudiging is mogelijk voor uniforme systemen ($V_0(\mathbf{r}) = 0$) in rust met stationaire oplossing $\psi_0 = \sqrt{n}$ en chemische potentiaal $\mu = gn$, aangezien de eigenmodes dan vlakke golven zijn,

$$\begin{pmatrix} \delta\psi \\ \delta\psi^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-\omega t} \tag{1.43}$$

dit resulteert in volgend gereduceerd systeem,

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + gn & g\psi_0^2 \\ -g\psi_0^{*2} & -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - gn \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{\mathbf{k}} \\ V_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \tag{1.44}$$

Diagonalisatie levert vervolgens het excitatiespectrum:

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\big(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2gn\big)}. \tag{1.45}$$

Bogoliubov transformatie

Via de eigenmodes kan men dan de uiteindelijke Hamiltoniaan van de vorm,

$$\hat{H}_{Bog} = \sum_k \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}, \tag{1.46}$$

bekomen. Hier stemmen $\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}$ en $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ overeen met de creatie- en annihilatie-operatoren van de elementaire excitaties, gerelateerd aan de originele operatoren $\hat{a}_{\mathbf{k}} = \int \delta\hat{\psi}(\mathbf{r},t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}/\hbar}d\mathbf{r}$ via de Bogoliubov transformatie:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} - V^*_{-\mathbf{k}}\hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}}. \tag{1.47}$$

Opdat deze nieuwe operatoren zouden voldoen aan de bosonische commutatierelaties wordt een voorwaarde opgelegd:

$$|U_{\mathbf{k}}|^2 - |V_{-\mathbf{k}}|^2 = 1. \tag{1.48}$$

Aangezien deze grootheid behouden is bij tijdsevolutie wordt dit ook de Bogoliubov norm genoemd [12, 16, 18].

1.4.3 Truncated Wigner methode

Een (andere) methode die ons toestaat een stap verder te gaan dan de Gross-Pitaevskii vergelijking is de truncated Wigner methode. Hierbij stapt men af van dynamica van golffuncties in de Hilbertruimte en wordt in plaats daarvan de kwantumtoestand voorgesteld in de faseruimte van klassieke velden $\psi(\mathbf{r})$ en $\psi^*(\mathbf{r})$ [16]. Deze methode komt in zijn simpelste vorm neer op ruis toevoegen aan de gemiddeld veld beschrijving om vacuümfluctuaties in rekening te brengen. Aangezien deze ruis wordt toegevoegd aan elke mode in het klassieke veld ψ, moet het veld gediscretiseerd worden ($\psi_j = \psi(\mathbf{r_j})$) om te vermijden dat de ingevoegde ruis optelt tot oneindig wanneer er een oneindig aantal modes is [36]. De kwantumfluctuaties worden hier in rekening genomen door het kwantum veld uit de GPE af te beelden op een klassieke verdeling in de faseruimte. Door de overgang te maken naar klassieke velden verliezen we het operatorkarakter en de bijhorende commutatierelaties. De manier waarop operatoren geordend worden wordt nu vastgelegd door de faseruimte representatie. Er zijn verschillende mogelijkheden, voor deze thesis beperken we ons echter tot de Wigner W-representatie, deze representatie werkt met symmetrische ordening en is de meest courante [16].

De Wigner distributie $W(\psi,\psi^*)$ geassocieerd met de dichtheidsmatrix $\hat{\rho}$ wordt gedefinieerd als de Fourier getransformeerde van de karakteristieke functie $\chi(\lambda,\lambda^*)$ [16, 36, 37]:

$$W(\psi,\psi^*) = \frac{1}{\pi^2}\int e^{-\lambda\psi^*+\lambda^*\psi}\chi(\lambda,\lambda^*)d^2\lambda. \tag{1.49}$$

Hier is $d^2\lambda = d(\mathrm{Re}[\lambda])d(\mathrm{Im}[\lambda])$ en wordt de karakteristieke functie gedefinieerd als

$$\chi(\lambda,\lambda^*) = \mathrm{Tr}\big[\hat{\rho}e^{\lambda\hat{\psi}^\dagger - \lambda^*\hat{\psi}}\big]. \tag{1.50}$$

De momenta van quasi-waarschijnlijkheidsverdeling $W(\psi,\psi^*)$[6] stemmen overeen met verwachtingswaarden van symmetrisch geordende operatoren,

$$\int d^2\psi\psi^r(\psi^*)^s W(\psi,\psi^*) = \big(\frac{\partial}{\partial\lambda}\big)^s\big(-\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\big)^r\chi(\lambda,\lambda^*) = \langle\psi^r(\psi^*)^s\rangle_W = \langle\psi^r(\psi^*)^s\rangle_{symm}. \tag{1.51}$$

De verwachtingswaarde $\langle\psi^r(\psi^*)^s\rangle_{symm}$ geeft het gemiddelde over alle mogelijke manieren waarop de operatoren geordend kunnen worden. Deze symmetrisatie toepassen op de dichtheidsoperator van het multimode systeem resulteert in

$$\langle\psi_j^\dagger\psi_j\rangle_{symm} = \frac{1}{2}\langle\psi_j^\dagger\psi_j + \psi_j\psi_j^\dagger\rangle = \langle\psi_j^\dagger\psi_j\rangle + \frac{1}{2} \tag{1.52}$$

zodat het gebruik van de Wigner distributie zorgt voor een verwachtingswaarde $\langle\psi^r(\psi^*)^s\rangle_W$ die een bezetting van $1/2$ toevoegd aan elke mode. Het is door deze representatie van het vacuum met een gemiddelde bezetting verschillend van nul dat de Wigner distributie het effect van kwantumfluctuaties in rekening kan nemen in een semiklassieke theorie. Daarnaast toont deze uitdrukking ook meteen waarom een discretisatie van het veld nodig is.

Via operator correspondentie (de actie van een operator op een dichtheidsoperator $\hat{\rho}$ gaat gepaard met de actie van een corresponderende differentiaaloperator op de Wigner functie), kunnen de bewegingvergelijkingen voor de gediscretiseerde velden $\hat{\mathbf{\Psi}} = \hat{\psi}_1,\ldots,\hat{\psi}_L$ afgebeeld worden op een partiële differentiaalvergelijking [7][16, 37, 38],

$$i\hbar\partial_t W(\Psi,\Psi^*,t) = \sum_j\{-\big(\frac{\partial}{\partial\psi_j}\mathcal{F}_j + \frac{\partial}{\partial\psi_j^*}\mathcal{F}_j^*\big) + \frac{g}{4\Delta V^2}\frac{\partial^2}{\partial\psi_j\partial\psi_j^*}\big(\frac{\partial}{\partial\psi_j^*}\psi_j^* - \frac{\partial}{\partial\psi_j}\psi_j\big)\}W(\Psi,\Psi^*,t). \tag{1.53}$$

ΔV duid hier op de discretisatie van het grid en $\mathcal{F}_j = \mathbb{F}(\mathbf{r} = \mathbf{r_j})$ is een krachtterm die op de Gross-Pitaevskii functionaal wijst. In de ijle gas limiet $g \to 0$ met constante interactie-energie $g|\psi|^2$ zorgt de ruis voor een statistische fluctuatie van het veld rond haar gemiddeld veld waarde. Vergelijking van de grootteorde van de verschillende termen in (1.53) toont dat men accurate resultaten kan verwachten wanneer de derde orde afgeleide term verwaarloosd wordt[38]. Op deze manier bekomt men de truncated Wigner benadering[36],

$$i\hbar\partial_t W(\Psi,\Psi^*,t) \approx -\sum_j\big(\frac{\partial}{\partial\psi_j}\mathcal{F}_j + \frac{\partial}{\partial\psi_j^*}\mathcal{F}_j^*\big)W(\Psi,\Psi^*,t). \tag{1.54}$$

De evolutie van $W(\Psi,\Psi^*,t)$ kan in deze benadering afgebeeld worden op volgende set differentiaalvergelijkingen:

$$i\hbar\partial_t\psi_j(t) = \mathcal{F}_j(t)dt, \tag{1.55}$$

voor de velden ψ_j, wat niets anders is dan de Gross-Pitaevskii vergelijking (1.37). De fluctuaties worden nu in rekening genomen door een ensemble van klassieke velden $\psi(\mathbf{r})$ te genereren die de Wigner distributie van de initiële toestand samplet, en deze vervolgens te laten evolueren volgens Gross-Pitaevskii dynamica [36].

Meer specifiek wordt de intiële toestand gesampled met,

$$\psi_j = \psi_j^{(0)} + \Delta Z_j, \tag{1.56}$$

[6] Aangezien $W(\psi,\psi^*)$ wel genormaliseerd is over de gehele faseruimte maar niet strikt positief is, mag deze geen waarschijnlijkheidsverdeling van de toestand van het systeem genoemd worden [16].

[7] In zijn volledige vorm heeft deze vergelijking nog een extra difusieterm waardoor deze de vorm van een Fokker-Planck vergelijking verkrijgt.

waarbij $\psi_j^{(0)}$ de veldamplitudes zijn van het initieel volledig gecondenseerde fluïdum en ΔZ_j een complexe willekeurige Gaussvariabele is met variantie $1/2$ die de vacuumruis invoert [16]. De ruis die op deze manier wordt toegevoegd draagt bij aan de niet-lineaire term $g|\psi|^2$ in (1.53), om te voorkomen dat deze flucturerende term de gemiddeld veld effecten zou overmeesteren wordt volgende voorwaarde opgelegd voor wanneer deze benadering geldig is:

$$N \ll \mathcal{N}/2 \tag{1.57}$$

met N het aantal deeltjes en $\mathcal{N}$ het aantal modes[36].

Het aantal samples dat genomen werd om over uit te middelen voor het uiteindelijke resultaat van de truncated Wigner simulaties voor deze thesis was steeds gelijk aan 1000.

1.4.4 Volledige Hamiltoniaan in de één-mode benadering

Een volgende aanname die wordt gemaakt is dat het spinor-1 condensaat behandeld kan worden in de één-mode benadering. In zijn geheel is het condensaat namelijk te groot om computationeel exacte oplossingen te bekomen voor fysiek zinvolle systemen. Via de één-mode benadering kan deze computationele complexiteit beperkt worden door spindynamica apart te beschrijven van de ruimtelijke dynamica voor kleine sterk opgesloten systemen, waar de ruimtelijke momentum excitaties van de harmonische valpotentiaal veel hoger in energie zijn dan de beschouwde spinexcitaties ($\hbar\omega_{val} \gg U$). De energieschalen voor het ruimtelijke deel van de dynamica worden zo groot gemaakt dat alle atomen beperkt worden tot dezelfde tijdsonafhankelijke ruimtelijke mode[8] [2], de grondtoestand, en de spindynamica apart kan worden beschouwd. Deze drastische reductie van het aantal vrijheidsgraden naar een drie-mode systeem vereenvoudigt het systeem zodanig dat een numeriek exacte oplossing van de dynamica kan worden beschouwd [16, 39]. De veldoperatoren worden dan gefactoriseerd als $\hat{\psi}_m(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r})\hat{a}_m$, waar bij $\hat{a}_m(t)$ een deeltje in spin mode m annihileert op tijd t.

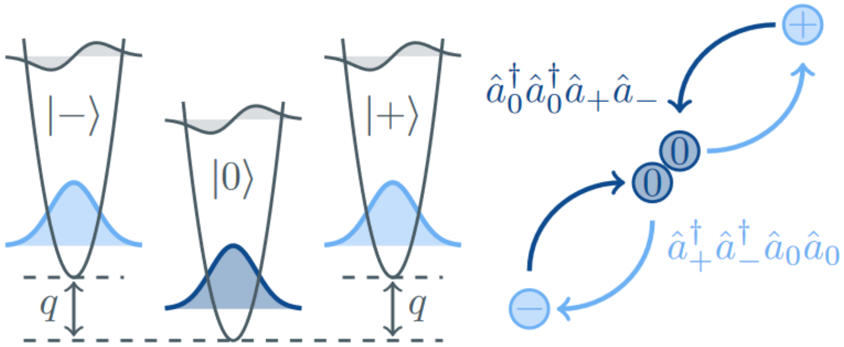
Voor het spin-1 condensaat vinden interacties van het veld $\hat{\Psi} = (\hat{\psi}_+\hat{\psi}_0\hat{\psi}_-)^T$ plaats via twee verschillende interactiekanalen, gekarakteriseerd door het totaal angulair moment S van het bijhorende verstrooiingsproces. Spin-onafhankelijke interacties worden geassocieerd met S=0 en spin-afhankelijke interacties, waarbij spin wordt uitgewisseld bij de botsing van twee deeltjes, met S=2. Aangezien het condensaat een ijl gas is, kunnen deze interacties benaderend beschreven kunnen worden met een contactpotentiaal $g_S = 4\pi\hbar^2 a_S/m$ waar de verstrooiingslengte a_S aanduidt met welke interactie men te maken heeft. De sterkte van deze interacties wordt in de Hamiltoniaan uiteindelijk gegeven door $c_0 = (g_0 + 2g_2)/3$ en $c_2 = (g_2 - g_0)/3$, zoals eerder ook besproken in het onderdeel over spinorcondensaten [9]. De één-mode benadering vindt zijn oorsprong dan in het feit dat de verstrooiingslengtes a_0 en a_2 typisch vergelijkbaar zijn in grootte [23, 40]. Dit zorgt ervoor dat de spin-onafhankelijke interacties hier zullen domineren ($|c_2| \ll c_0$) en maakt het mogelijk de spin-afhankelijke dynamica als een storing te beschouwen. De naam wijst op de uiteindelijke aanname dat alle hyperfijntoestanden dezelfde ruimtelijke golffunctie bezetten, wat de factorisatie die hierboven al vermeld werd mogelijk maakt.

Deze factorisatie met de bijhorende normalisatie van de ruimtelijke golffunctie en spinpopulatie,

$$\int d\mathbf{r}\left|\chi(\mathbf{r})\right|^2 = 1 \qquad \text{en} \qquad \sum_m \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle = N, \tag{1.58}$$

[8] Experimenteel gebeurd dit door middel van een nauwe laserval.

[9] Het teken van c_2 geeft aan of ferromagnetische ($c_2 < 0$) of antiferromagnetische ($c_2 > 0$).



Figuur 1.2: Het spin-1 condensaat in drie-mode vorm in de één-mode benadering. Het afgebeelde verstrooiingsproces stemt overeen met de twee laatste termen in 1.61 die de annihilatie of creatie van een spinpaar vanuit twee spin nul deeltjes uitdrukken.

leidt tot volgende vereenvoudigde Hamiltoniaan die nu losgekoppeld is van de ruimtelijke dynamica:

$$\mathcal{H}_S = q\left(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-\right) + \frac{U}{2}\hat{\mathbf{S}}^2, \tag{1.59}$$

met interactieconstante $U = c_2 \int |\chi(\mathbf{r})|^4 \, d\mathbf{r}$ en $\hat{N}_{+1} = \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+$ de teloperator die aangeeft hoeveel deeltjes zich in de $|+1\rangle$ toestand bevinden (idem voor $\hat{N}_{-1}$).
De Heisenbergbewegingsvergelijkingen voor de dynamica zien er dan als volgt uit:

$$i\hbar\partial_t \hat{a}_m = [\hat{a}_m, \hat{\mathcal{H}}_S]. \tag{1.60}$$

Ondanks dat het ruimtelijke aspect van de dynamica niet in rekening wordt genomen, is dit toch een goede benadering voor kleine en sterk opgesloten condensaten, waar de vorming van magnetisch domeinen wordt onderdrukt [2, 23, 41–43].

De verstrooiingsprocessen die plaatsvinden worden weergegeven door

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \big(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_- \hat{a}_- - 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_- + 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_0 + 2\hat{a}_-^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_- \hat{a}_0 + 2\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_- + 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0\big). \tag{1.61}$$

In de laatste twee termen is te zien hoe creatie of annihilatie van een spinpaar (spin mixing) tot stand komt vanuit twee deeltjes in de spin-0 toestand,

$$(m = 0) + (m = 0) \rightleftharpoons (m = +1) + (m = -1). \tag{1.62}$$

Op deze manier kan het aantal deeltjes per mode variëren, terwijl het totaal aantal deeltjes N en angulair moment langs de z-as $\langle \hat{S}_z \rangle = \langle \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_- \rangle$ bewaard blijven [3, 16].

Exacte oplosssing

Wanneer de magnetisatie beperkt wordt tot een vaste waarde $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$ zal het aantal deeltjes in de $|+\rangle$ en $|-\rangle$ toestanden steeds hetzelfde zijn. Hierdoor kan de Fock ruimte gereduceerd worden tot een kleinere subruimte met dimensie N/2+1, wat het bepalen van de exacte oplossing van de Schrödingerverglijking computationeel minder intensief maakt en toestaat om algemeen te werken met een paarnummer $N_p = \langle \hat{a}_\pm^\dagger \hat{a}_\pm \rangle$. De Fock ruimte $|n_+, n_0, n_+\rangle$ wordt zo gereduceerd tot $|N_p, N - 2N_p, N_p\rangle$.

De matrixelementen $H_{nm} = \langle n|\mathcal{H}_s|m\rangle$ in de Schrödingervergelijking,

$$i\partial_t \langle n\,|\psi\rangle = \sum_{m=0}^{N/2} \langle n|\mathcal{H}_s|m\rangle\langle m\,|\psi\rangle\,, \tag{1.63}$$

worden bepaald door de Hamiltoniaan $\mathcal{H}_s$ te laten inwerken op de subruimte van Fock toestanden via,

$$\hat{a}_i\,|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i}\,|\ldots,n_i-1,\ldots\rangle\,, \tag{1.64}$$

$$\hat{a}_i^\dagger\,|\ldots,n_i,\ldots\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|\ldots,n_i+1,\ldots\rangle\,, \tag{1.65}$$

met $i = -1, 0, +1$. Gebruik maken van de orthogonaliteit van de Fock toestanden $\langle n\,|m\rangle = \delta_{n,m}$, resulteert in

$$\begin{aligned} H_{nm} = m[2q + U(2(N-2m)-1)]\delta_{n,m} &+ Um\sqrt{(N-2m+1)(N-2m+2)}\delta_{n,m-1} \\ &+ U(m+1)\sqrt{(N-2m)(N-2m-1)}\delta_{n,m+1}. \end{aligned} \tag{1.66}$$

De tridiagonale vorm van deze Hamiltoniaan vindt zijn oorsprong in het verstrooiingsproces, waar de creatie of annihilatie van slechts één spinpaar is toegestaan per interactie.

Bogoliubov expansie

Wanneer een groot aantal deeltjes zich in de $|0\rangle$ toestand bevinden of anders gezegd wanneer het aantal paren klein is ($n_p = N_p/N \ll 1$), dan kan de creatie van spin paren ($|\pm\rangle$ toestanden) benaderd worden als een storing op een condensaat met N deeltjes in de $|0\rangle$ toestand. In deze benadering worden de operatoren $(\hat{a}_+, \hat{a}_0, \hat{a}_-)$ vervangen door $(\hat{\delta}_+, \sqrt{N}, \hat{\delta}_-)$ en wordt vervolgens de Hamiltoniaan geëxpandeerd tot op tweede orde in $\delta_\pm$, wat resulteert in de Bogoliubov Hamiltoniaan [2, 12, 16],

$$\hat{\mathcal{H}}_S \approx (q+UN)(\hat{\delta}_+^\dagger\hat{\delta}_+ + \hat{\delta}_-^\dagger\hat{\delta}_-) + UN(\hat{\delta}_+\hat{\delta}_- + \hat{\delta}_+^\dagger\hat{\delta}_-^\dagger). \tag{1.67}$$

Diagonalisatie van deze Hamiltoniaan kan via de Bogoliubov transformatie $\hat{\delta}_\pm = u\hat{b}_\pm + v\hat{b}_\mp^\dagger$ met coëffciënten $u, v = \pm\sqrt{\frac{q+UN}{2\epsilon} \pm \frac{1}{2}}$, of door de Heisenberg bewegingsvergelijkingen uit te schrijven en in matrixvorm te gieten:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \hat{\delta}_+ \\ \hat{\delta}_- \\ \hat{\delta}_+^\dagger \\ \hat{\delta}_-^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q+UN & 0 & 0 & UN \\ 0 & q+UN & UN & 0 \\ 0 & -UN & -(q+UN) & 0 \\ -UN & 0 & 0 & -(q+UN) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\delta}_+ \\ \hat{\delta}_- \\ \hat{\delta}_+^\dagger \\ \hat{\delta}_-^\dagger \end{pmatrix}. \tag{1.68}$$

Beide resulteren in een gediagonaliseerde Hamiltoniaan met volgende vorm:

$$\mathcal{H}_S \approx \hbar\omega(\hat{b}_+^\dagger\hat{b}_+ + \hat{b}_-^\dagger\hat{b}_-) + Cte, \tag{1.69}$$

waarbij ϵ het spectrum voorstelt en gegeven wordt door,

$$\hbar\omega = \sqrt{q(q+2UN)}. \tag{1.70}$$

We zien hier terugkomen dat het effect van interacties vastgelegd wordt door de parameterverhouding q/UN. De geldigheid voor systemen met slechts een klein aantal spinparen brengt de voorwaarde dat q/U veel groter dan 1 moet zijn (hoge-Zeeman regime), zodat het bereik van magnetische velden waarvoor Bogoliubov theorie een betrouwbare benadering is, groeit met stijgende N.

Na een quench vanuit de toestand zonder spinparen wordt de tijdsafhankelijkheid van de spinparen N_p benaderend gegeven door [2]:

$$N_p(t) = \frac{U^2}{\hbar^2\omega_B^2}\sin^2(\omega_B t). \tag{1.71}$$

Gemiddeld veld en truncated Wigner benadering

De gemiddeld veld benadering kan toegepast worden in de thermodynamische limiet $N \gg 1$, wanneer het gekwantiseerde karakter van het systeem kan worden verwaarloosd. De veldoperatoren worden dan vervangen door $\alpha_m = \langle \hat{a}_m \rangle$, wat ons volgende energiefunctionaal geeft

$$E_0 = q(|\alpha_+|^2 + |\alpha_+|^2) + \frac{U}{2}(|\alpha_+|^4 + |\alpha_-|^4 - 2|\alpha_+|^2|\alpha_-|^2 + 2|\alpha_+|^2|\alpha_0|^2 + 2|\alpha_-|^2|\alpha_0|^2 + 2\alpha_+\alpha_-\alpha_0^2 + 2\alpha_0^{*2}\alpha_+\alpha_-). \quad (1.72)$$

Met dan $|\alpha_\pm|^2 = n_\pm$. De bewegingsvergelijkingen bestaan dan uit een bijhorende set van gekoppelde Gross-Pitaevskii vergelijkingen,

$$i\hbar\partial_t\alpha_+ = q\alpha_+ + U\big[(|\alpha_0|^2 + |\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)\alpha_+ + \alpha_-^*\alpha_0\alpha_0\big] \quad (1.73)$$

$$i\hbar\partial_t\alpha_0 = U\big[(|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2)\alpha_0 + \alpha_0^*\alpha_+\alpha_-\big] \quad (1.74)$$

$$i\hbar\partial_t\alpha_- = q\alpha_- + U\big[(|\alpha_0|^2 + |\alpha_-|^2 - |\alpha_+|^2)\alpha_- + \alpha_+^*\alpha_0\alpha_0\big]. \quad (1.75)$$

Naast de gemiddeld veld schatting, is het ook op basis van deze vergelijken dat de truncated Wigner benadering geïmplementeerd wordt door eerst de beginvoorwaarde te samplen uit de Wigner distributie en deze vervolgens te laten evolueren volgens de Gross-Pitaevskii vergelijkingen (zie 1.4.3).

1.5 Experimenteel

De dynamica die bestudeerd werd voor deze thesis is gebaseerd op een experimentele en numerieke studie die uitgevoerd werd door B. Evrard et al. [2]. Zij onderzochten de dynamica van een collectie van N spin-1 natriumatomen in een nauwe laser val. Deze opsluiting zorgt ervoor dat alle atomen zich in dezelfde ruimtelijke mode $\psi(\mathbf{r})$ bevinden, wat toestaat de spin als enige relevante vrijheidsgraad te beschouwen voor de dynamica, het experimentele equivalent van de één-mode benadering die hierboven besproken werd.

De dynamica wordt dus vastgelegd door de Hamiltoniaan (1.59) uit vorige sectie. Experimenteel worden de atomen onderworpen aan een magneetveld $\mathbf{B}$, aangelegd in de z-richting. Dit zorgt voor een verschuiving in de energieën van de toestanden $|m\rangle$. Tot op tweede orde ziet het deel van de Hamiltoniaan dat afkomstig is van de Zeeman verschuiving eruit als:

$$\hat{H}_Z = \sum_{i=1}^{N} p\hat{s}_{zi} + q\hat{s}_{zi}^2, \quad (1.76)$$

met p $\propto \mathbf{B}$ en q $\propto \mathbf{B}^2$ overeenstemmend met de lineaire en kwadratische Zeeman verschuiving. Aangezien $\hat{H}_{int} = U/2\hat{\mathbf{S}}^2$ is het echter zo dat $[\hat{S}_z, \hat{H}_{int}] = 0$, zodat de eerste term hier een constante van beweging is en via een unitaire transformatie kan worden verwijderd, waardoor deze niet verschijnt in de uiteindelijke Hamiltoniaan, zoals al werd aangehaald bij de introductie van de Hamiltoniaan voor het spinorcondensaat [44].

Om nu de dynamica te bestuderen werd een Bose-Einstein condensaat met $N \approx 5000$ atomen geprepareerd in de $|m = 0\rangle$ toestand. Het condensaat werd vervolgens met een plotse quench van het magnetisch veld uit evenwicht gebracht om de daaropvolgende dynamica richting een nieuw evenwicht te observeren. Het prepareren van alle atomen in de $|m = 0\rangle$ toestand gebeurd via het aanleggen van een sterk magnetisch veld, dit verschuift de energieniveaus zodanig dat de $|\pm 1\rangle$ toestanden energetisch ontoegankelijk worden. Vervolgens wordt dit magnetisch veld plots gequencht naar een veel lagere waarde waardoor de energieniveaus weer dalen en spin mixing op gang komt [2]. Op deze manier kan het initiële spin-0 condensaat evolueren naar een gefragmenteerd condensaat met drie macroscopisch bezette toestanden.

Na relaxatie wordt verwacht dat in thermisch evenwicht de populatie van elke toestand overeen zal komen met 1/3. Dit is echter niet het geval, zowel in het experimentele artikel van B. Evrard et al. [2] als in de theoretische studie van L. Fernandes et al. [3]. Zo'n gedrag impliceert dat de eindtoestand van het condensaat niet kan worden beschreven via een thermische dichtheidsmatrix ($\rho \propto \exp(-\hat{H}_{int}/k_B T)$). De verklaring voor dit niet-thermisch karakter schuilt echter in het feit dat S_z een behouden grootheid is. Het systeem heeft in dit geval namelijk slechts één vrijheidsgraad S, zodat het aantal vrijheidsgraden gelijk is aan het aantal behouden grootheden. Systemen met deze eigenschap zijn integreerbaar [45].

Het is deze integreerbaarheid die een probleem vormt voor het bereiken van de macroscopische 1/3 bezetting na relaxatie. De 'eigenstate thermalization hypothesis (ETH)' stelt namelijk dat in veeldeeltjessystemen elke energie eigentoestand $|\Psi\rangle_E$ 'typisch' is aangezien de verwachtingswaarde van een macroscopische observabele geëvalueerd met $|\Psi\rangle_E$, dicht ligt bij de verwachtingswaarde voor thermisch evenwicht bekomen via het microcanonisch ensemble. Een gevolg van deze hypothese is thermalisatie, van een initieel golfpakket $|\Psi\rangle\,(t=0)$ bestaande uit een combinatie van vele eigentoestanden met vergelijkbare energie E wordt namelijk verwacht dat de verwachtingswaarde over de tijd $\langle\Psi(t)|\hat{\mathcal{O}}|\Psi(t)\rangle$ zal overeenkomen met de verwachtingswaarde bij thermalisatie. Deze hypothese kan echter, zeer breed genomen, beschouwd worden als het kwantum equivalent van ergodiciteit [31] en gaat niet op voor integreerbare systemen.

In een poging om de stap te zetten naar thermalisatie in het beschouwde spin-1 condensaat zal deze thesis eruit bestaan een systeem te onderzoeken waarbij de integrabiliteit gebroken wordt door middel van een symmetriebrekende term die wordt toegevoegd aan de Hamiltoniaan [2]:

$$\hat{H}' = \hat{H} + \Omega\hat{S}_x. \tag{1.77}$$

Deze term breekt de integrabiliteit van het systeem als gevolg van het feit dat $[\hat{S}_x, \hat{S}_z] \neq 0$ waardoor de $\hat{S}_z$ operator niet langer commuteert met de (interactie)Hamiltoniaan. Dit zorgt ervoor dat de voorheen behouden $S_z = N_+ - N_-$ magnetisatie niet langer behouden is zodat ook het feit dat $N_+ = N_-$ was door $\langle\hat{S}_z\rangle = 0$, wordt opgeheven. De dynamica ondervindt nu wel een effect van het lineaire Zeemaneffect en er kunnen nieuwe verstrooiingsprocessen plaatsvinden. Het doel van deze thesis is om te achterhalen hoe de breking van integrabiliteit de dynamica van het condensaat verandert en of dit inderdaad tot de verwachte thermalisatie zal leiden.

2 | Breking van integrabiliteit

2.1 De Hamiltoniaan

Zoals hierboven vermeld wordt de integrabiliteit van het systeem gebroken door een extra term $\Omega\hat{S}_x$ toe te voegen aan de Hamiltoniaan zodat deze er nu uitziet als

$$\mathcal{H}_S = q\big(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-\big) + \frac{U}{2}\hat{\mathbf{S}}^2 + \Omega\hat{S}_x. \tag{2.1}$$

Net zoals de eerste term in de Hamiltoniaan afkomstig is van de qf_z^2 term in de Hamiltoniaan die geïntroduceerd werd in het onderdeel over spinorcondensaten, wordt de extra term geconstrueerd door gebruik te maken van de f_x component van de spin-1 matrices $\mathbf{f}$:

$$\hat{F}_x = \int d\mathbf{r}\hat{\mathbf{\Psi}}^\dagger(\mathbf{r}) f_x \hat{\mathbf{\Psi}} = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_+^\dagger \\ \hat{\psi}_0^\dagger \\ \hat{\psi}_-^\dagger \end{pmatrix}^T \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\psi}_+ \\ \hat{\psi}_0 \\ \hat{\psi}_- \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\hat{\psi}_0^\dagger(\hat{\psi}_+ + \hat{\psi}_-) + \hat{\psi}_0(\hat{\psi}_+^\dagger + \hat{\psi}_-^\dagger)\big). \tag{2.2}$$

Opnieuw wordt de één-mode benadering toegepast waarbij de overgang gemaakt wordt van $\hat{F}_x$ naar $\hat{S}_x$ en van $\hat{\psi}_m$ naar $\hat{a}_m$. Zodat de nieuwe term volgende vorm heeft:

$$\hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_- + \hat{a}_0 \hat{a}_+^\dagger + \hat{a}_0 \hat{a}_-^\dagger), \tag{2.3}$$

met dan de volledige Hamiltoniaan

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_S = q\big(\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-\big) + \frac{U}{2}\big(&\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_+ + \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_- \hat{a}_- - 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_- + 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_0 + \\ &2\hat{a}_-^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_- \hat{a}_0 + 2\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ \hat{a}_- + 2\hat{a}_+^\dagger \hat{a}_-^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0\big) + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_- + \hat{a}_0 \hat{a}_+^\dagger + \hat{a}_0 \hat{a}_-^\dagger).\end{aligned} \tag{2.4}$$

Waarbij de eerste term afstemt van het kwadratisch Zeeman effect en de tweede term, evenredig met $\hat{\mathbf{S}}^2$, de verstrooingsprocessen die kunnen plaatsvinden beschrijft waarvan de laatste twee termen de twee mogelijke spin mixing processen uitdrukken. De derde term stemt overeen met de aanleg van een extra magneetveld in de x-richting, wat resulteert in de breking van het behoud van S_z magnetisatie doordat $[\hat{S}_x, \hat{S}_z] \neq 0$. De toegevoegde term stemt overeen met een lineair Zeemaneffect, ditmaal afkomstig van een magneetveld aangelegd in de x-richting in plaats van in de z-richting. Aangezien S_x geen behouden grootheid is van de Hamiltoniaan draagt dit effect hier wel bij aan de dynamica en speelt zelfs een cruciale rol voor het bereiken van thermisch evenwicht. Doordat deze term het behoud van S_z opheft, is nu ook de gelijkheid tussen het aantal deeltjes N_+ en N_-, dat uitgedrukt werd door het behoud van $S_z = N_+ + N_-$ en $\langle S_z \rangle = 0$ niet langer behouden. Dit zien we ook in de uitdrukking van de symmetriebrekende term, deze beschrijft verstrooingsprocessen waarbij een spin-0 deeltje kan worden omgezet in een spin-$\pm$ deeltje door een annihilatie van een spin-0 en een daaropvolgende creatie van een spin-$\pm$ en vice versa. De belangrijkste observatie is echter dat dit voor de spin $+1$ en -1 toestanden in aparte termen (en dus processen) plaatsvindt waardoor een excitatie vanuit de spin-0 toestand niet langer alleen maar mogelijk is in paren en bijgevolg het behoud van $N_+ = N_-$ verbroken is.

2.2 Exacte oplossing

De symmetriebrekende term zorgt niet alleen voor een corresponderende extra term in de exacte oplossing, maar heeft ook invloed op de dimensie van de Fockruimte. Dat de magnetisatie S_z, en bijgevolg ook de gelijkheid tussen de deeltjesaantallen, niet langer behouden is, betekent namelijk dat er nu heel wat meer toestanden beschikbaar zijn waarbij N_+ niet per se gelijk hoeft te zijn aan N_-. De Fockruimte kan nog wel gereduceerd worden, alleen niet meer zo sterk als in het originele systeem. Het totaal aantal deeltjes $N = N_+ + N_0 + N_-$ is namelijk wel nog behouden, waardoor toestanden met $N_+ \neq N_-$ nu wel mogelijk zijn maar toestanden waarvoor $N_+ + N_- \geq N$ onfysisch blijven. Dit brengt de dimensie van de Fockruimte van N^2 naar $(N+1)(N+2)/2$ en hoewel er nu twee getallen nodig zullen zijn om de toestand te karakteriseren kan de Fockruimte wel nog beperkt worden tot $|n_+, N - n_+ - n_-, n_-\rangle$ met de voorwaarde dat $N_+ + N_- \leq N$. Het feit dat de Fockruimte niet meer zo sterk kan worden gereduceerd zorgt ervoor dat het bepalen van de exacte oplossing computationeel veel zwaarder wordt, wat de grootte van de systemen die beschouwd kunnen worden beperkt.

De bepaling van de exacte oplossing gebeurt echter volledig analoog aan hierboven, door de creatie- en annihilatie-operatoren te laten inwerken op de Fock toestanden en opnieuw gebruik te maken van hun orthogonaliteit. De matrixelementen afkomstig van de symmetriebrekende term zijn dan:

$$\langle n|\hat{S}_x|m\rangle = \langle n|\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_+ + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_- + \hat{a}_0 \hat{a}_+^\dagger + \hat{a}_0 \hat{a}_-^\dagger |m\rangle . \tag{2.5}$$

En levert uiteindelijk volgende bijdrage

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{S}_x|m\rangle = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\big[&\sqrt{m_+}\sqrt{m_0+1}\,\delta_{n_+,m_+-1}\delta_{n_-,m_-} + \sqrt{m_-}\sqrt{m_0+1}\,\delta_{n_+,m_+}\delta_{n_-,m_--1}\\ &+ \sqrt{m_++1}\sqrt{m_0}\,\delta_{n_+,m_++1}\delta_{n_-,m_-} + \sqrt{m_-+1}\sqrt{m_0}\,\delta_{n_+,m_+}\delta_{n_-,m_-+1}\big],\end{aligned} \tag{2.6}$$

wat dan kan worden omgeschreven naar een algemene vorm in termen van $m_\pm$ via $m_0 = N - m_+ - m_-$.
Dit resulteert met alle termen opnieuw samengenomen uiteindelijk in volgende uitdrukking voor de nieuwe matrixelementen:

$$\begin{aligned}H_{nm} &= m[2q + U(2(N-2m)-1)]\delta_{n,m} + Um\sqrt{(N-2m+1)(N-2m+2)}\,\delta_{n,m-1}\\ &+ U(m+1)\sqrt{(N-2m)(N-2m-1)}\,\delta_{n,m+1} + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\big[\sqrt{m_+}\sqrt{N-m_+-m_-+1}\,\delta_{n_+,m_+-1}\delta_{n_-,m_-}\\ &+ \sqrt{m_-}\sqrt{N-m_+-m_-+1}\,\delta_{n_+,m_+}\delta_{n_-,m_--1} + \sqrt{m_++1}\sqrt{N-m_+-m_-}\,\delta_{n_+,m_++1}\delta_{n_-,m_-}\\ &+ \sqrt{m_-+1}\sqrt{N-m_+-m_-}\,\delta_{n_+,m_+}\delta_{n_-,m_-+1}\big].\end{aligned} \tag{2.7}$$

2.3 Bogoliubov spectrum

Ook voor deze Hamiltoniaan kan de Bogoliubov expansie gemaakt worden, waarbij opnieuw wordt aangenomen dat een groot aantal deeltjes zich in de $|0\rangle$ toestand bevinden zodat de creatie en annihilatie van spin paren opnieuw als een storing kunnen beschouwd worden. Door de extra term zal echter ook de operator voor de spin-0 toestand nu als een storing beschouwd worden (aangezien creatie en annihilatie nu niet meer enkel via spin paren kan gebeuren). De operatoren $(\hat{a}_+, \hat{a}_0, \hat{a}_-)$

worden ditmaal dus vervangen door $(\hat{\delta}_+, \sqrt{N}+\hat{\delta}_0, \hat{\delta}_-)$. Vervolgens expanderen tot op tweede orde in $\hat{\delta}_m$, resulteert in

$$\mathcal{H}_{bog} = (q+UN)(\hat{\delta}_+^\dagger\hat{\delta}_+ + \hat{\delta}_-^\dagger\hat{\delta}_-) + UN(\hat{\delta}_+\hat{\delta}_- + \hat{\delta}_+^\dagger\hat{\delta}_-^\dagger) + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}(\hat{\delta}_0^\dagger\hat{\delta}_+ + \hat{\delta}_0^\dagger\hat{\delta}_- + \hat{\delta}_0\hat{\delta}_+^\dagger + \hat{\delta}_0\hat{\delta}_-^\dagger). \quad (2.8)$$

Doordat we hier voornamelijk geïnteresseerd zijn in het Bogoliubov spectrum wordt de specifieke Bogoliubov transformatie achterwege gelaten voor dit onderdeel en wordt meteen de matrix opgesteld voor diagonalisatie. Dit gebeurt op basis van de Heisenbergbewegingsvergelijkingen die deze Hamiltoniaan oplevert:

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_+ = (q+UN)\hat{\delta}_+ + UN\hat{\delta}_-^\dagger + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\hat{\delta}_0 \quad (2.9)$$

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_0 = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}(\hat{\delta}_+ + \hat{\delta}_-) \quad (2.10)$$

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_- = (q+UN)\hat{\delta}_- + UN\hat{\delta}_+^\dagger + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\hat{\delta}_0 \quad (2.11)$$

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_+^\dagger = -(q+UN)\hat{\delta}_+^\dagger - UN\hat{\delta}_- - \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\hat{\delta}_0^\dagger \quad (2.12)$$

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_0^\dagger = -\frac{\Omega}{\sqrt{2}}(\hat{\delta}_+^\dagger + \hat{\delta}_-^\dagger) \quad (2.13)$$

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\hat{\delta}_-^\dagger = -(q+UN)\hat{\delta}_-^\dagger - UN\hat{\delta}_+ - \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\hat{\delta}_0^\dagger. \quad (2.14)$$

In matrixvorm gieten geeft ons dan,

$$i\frac{\partial}{\partial_t}\begin{pmatrix}\hat{\delta}_+\\ \hat{\delta}_0\\ \hat{\delta}_-\\ \hat{\delta}_+^\dagger\\ \hat{\delta}_0^\dagger\\ \hat{\delta}_-^\dagger\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(q+UN) & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & UN\\ \frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0\\ 0 & \frac{\Omega}{\sqrt{2}} & (q+UN) & UN & 0 & 0\\ 0 & 0 & -UN & -(q+UN) & -\frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\Omega}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{\Omega}{\sqrt{2}}\\ -UN & 0 & 0 & 0 & -\frac{\Omega}{\sqrt{2}} & -(q+UN)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\delta}_+\\ \hat{\delta}_0\\ \hat{\delta}_-\\ \hat{\delta}_+^\dagger\\ \hat{\delta}_0^\dagger\\ \hat{\delta}_-^\dagger\end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Diagonalisatie resulteert hier in 6 eigenwaarden, 2 die overeenkomen met die van het oorspronkelijke systeem zonder symmetriebreking $(\pm\sqrt{q}\sqrt{q+2UN})$ en 4 nieuwe frequenties:

$$\omega_{Bog} = \pm\sqrt{\frac{q^2 + 2\Omega^2 + 2qUN \pm \sqrt{q}\sqrt{q+2UN}\sqrt{q^2+4\omega^2+2qUN}}{\sqrt{2}}}. \quad (2.16)$$

2.4 Gemiddeld veld benadering

Analoog aan het systeem met behouden S_z symmetrie kunnen in de gemiddeld veld benadering de veldoperatoren opnieuw vervangen worden door $\langle\hat{a}\rangle = \alpha_m$. Dit levert volgende extra term in de energiefunctionaal:

$$E_{0,S_x} = \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\left(\alpha_0^*\alpha_+ + \alpha_0^*\alpha_- + \alpha_0\alpha_+^* + \alpha_0\alpha_-^*\right). \quad (2.17)$$

Voor een notatie waarbij de Hamilton vergelijkingen uitgedrukt worden in termen van complexe velden, leidt dit tot volgende extra termen in de Gross-Pitaevskii vergelijkingen

$$\left\langle \frac{\partial E_{0,S_x}}{\partial \alpha_+^*} \right\rangle = \frac{\Omega}{\sqrt{2}} \alpha_0 \tag{2.18}$$

$$\left\langle \frac{\partial E_{0,S_x}}{\partial \alpha_0^*} \right\rangle = \frac{\Omega}{\sqrt{2}} \big(\alpha_+ + \alpha_-\big) \tag{2.19}$$

$$\left\langle \frac{\partial E_{0,S_x}}{\partial \alpha_-^*} \right\rangle = \frac{\Omega}{\sqrt{2}} \alpha_0. \tag{2.20}$$

Deze kunnen dan toegevoegd worden aan de originele vergelijkingen 1.73 om de nieuwe evolutie van de Hamiltoniaan te bekomen.

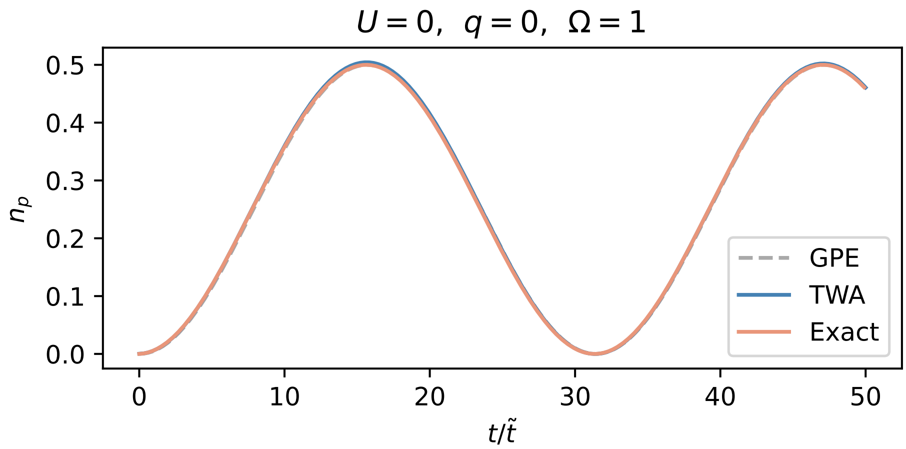
$$i\hbar\partial_t\alpha_+ = q\alpha_+ + U\big[(|\alpha_0|^2 + |\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)\alpha_+ + \alpha_-^*\alpha_0\alpha_0\big] + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\alpha_0 \tag{2.21}$$

$$i\hbar\partial_t\alpha_0 = U\big[(|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2)\alpha_0 + \alpha_0^*\alpha_+\alpha_-\big] + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\big(\alpha_+ + \alpha_-\big) \tag{2.22}$$

$$i\hbar\partial_t\alpha_- = q\alpha_- + U\big[(|\alpha_0|^2 + |\alpha_-|^2 - |\alpha_+|^2)\alpha_- + \alpha_+^*\alpha_0\alpha_0\big] + \frac{\Omega}{\sqrt{2}}\alpha_0. \tag{2.23}$$

2.5 Implementatie

De hierboven beschreven dynamica werd geïmplementeerd in Python. Om na te gaan of dit juist gebeurde worden de drie beschrijvingen die zullen worden beschouwd in de resultaten hier al vergeleken voor een geval waarbij deze alle drie dezelfde dynamica zouden moeten opleveren. We bekijken de dynamica van het condensaat wanneer in de Hamiltoniaan zowel q als U gelijk aan nul worden gesteld. Op deze manier blijft enkel de symmetriebrekende term over en is de Hamiltoniaan bovendien kwadratisch, wat ervoor zorgt dat voor deze parameters de truncated Wigner benadering en Gross-Pitaevskii vergelijkingen exact worden. Een kwadratische Hamiltoniaan zorgt namelijk voor lineaire dynamica, waarvan we kunnen verwachten dat deze door de Gross-Pitaevskii vergelijkingen correct wordt beschreven. Aangezien truncated Wigner in essentie bestaat uit Gross-Pitaevskii dynamica met toegevoegde ruis waarbij uitgemiddeld wordt over een groot aantal realisaties, verwachten we ook hier een overeenkomst met de exacte oplossing. Dit betekent dat we in dit regime inderdaad verwachten dat de dynamica van deze drie beschrijvingen overeen zal komen. In figuur 2.1 zien we dat dit voor de geobserveerde oscillaties ook het geval is, wat een sterke indicatie geeft dat de dynamica juist geïmplementeerd werd.



Figuur 2.1: Dynamica voor zowel de Gross-Pitaevskii vergelijkingen en de truncated Wigner benadering als de exacte oplossing voor een condensaat met $N = 50$, $q = 0$, $U = 0$ en $\Omega = 1$. De volle blauwe lijn duidt hier de dynamica in truncated Wigner benadering aan, de volle roze lijn de exacte oplossing en de grijze stippellijn stelt de Gross-Pitaevskii dynamica voor.

3 Dynamica zonder symmetriebreking

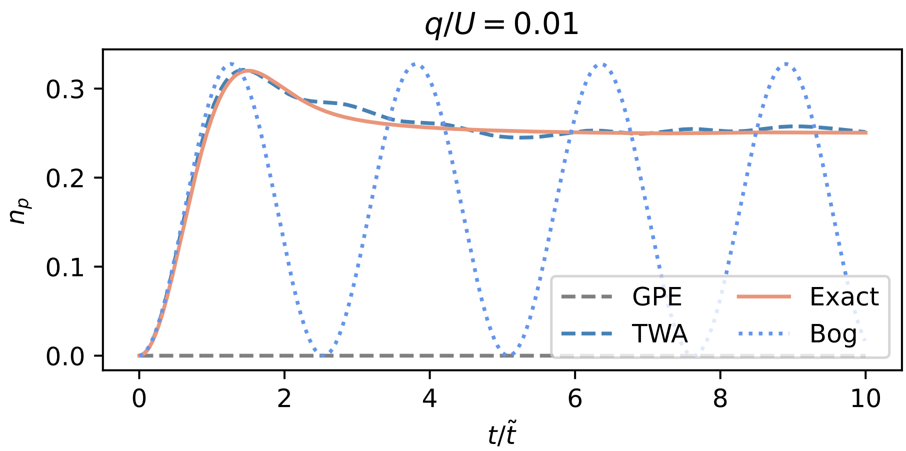
De resultaten die in dit hoofdstuk worden besproken zijn gereproduceerd op basis van een artikel van Fernandes et al. [3], waarin de dynamica voor het systeem met behouden $\hat{S}_z$ symmetrie onderzocht werd. Daarnaast werden deze resultaten ook gebruikt om de correctheid van de implementatie voor het nieuwe systeem te testen.

Na enkele voorbereidende berekeningen kunnen we nu de dynamica van het condensaat bestuderen. Hiervoor herhalen we eerst even hoe het systeem er precies uitziet. We nemen aan dat het gas geprepareerd is in de grondtoestand voor $q/U \to \infty$, de Fock toestand $|0, N, 0\rangle$ waarbij alle deeltjes zich in de spin-0 toestand bevinden. Dit was een gevolg van de kwadratische Zeeman term die een verschuiving van $q \propto \mathbf{B}^2$ veroorzaakt in de energieniveaus van $|m = \pm 1\rangle$ ten opzichte van $|m = 0\rangle$ [2]. Een zeer grote waarde van q, overeenstemmend met de aanleg van een sterk magnetisch veld, zal de energieniveaus van $|m = \pm 1\rangle$ dus zodanig verschuiven dat deze energetisch niet meer beschikbaar zijn en de deeltjes van het condensaat genoodzaakt zijn zich te beperken tot de $|m = 0\rangle$ toestand. Een plotse quench van het magnetisch veld naar een veel lagere waarde voor q/U heeft echter tot gevolg dat ook de Hamiltoniaan en de bijhorende grondtoestand abrupt veranderen waarbij het systeem uit evenwicht wordt geduwd. De dynamica die hier bestudeert wordt is de tijdsevolutie die plaatsvindt na deze kwantum quench wanneer het systeem op zoek gaat naar een nieuw evenwicht. De studie van deze niet-evenwichtsdynamica staat toe te bestuderen hoe de atomen verstrooiien naar de nu opnieuw energetisch beschikbare $|\pm 1\rangle$ toestanden.

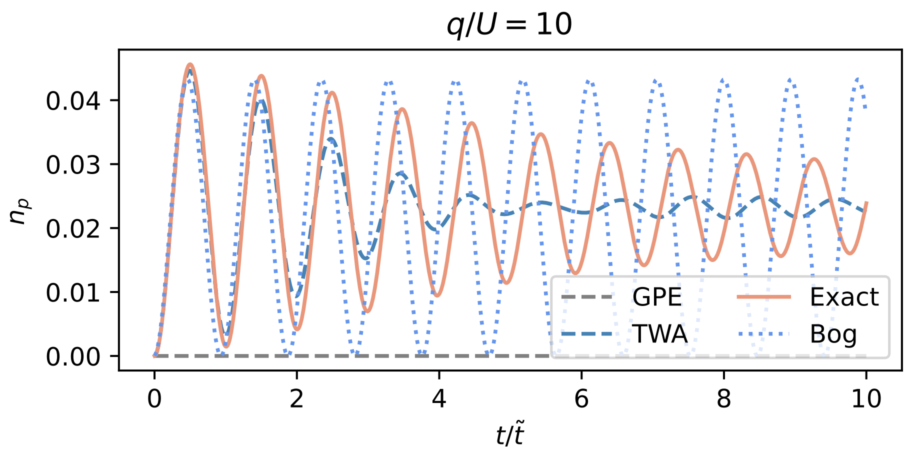
3.1 Spin mixing dynamica

De geobserveerde dynamica van het systeem kan opgesplitst worden in twee regimes, $q/U \gg 1$ en $q/U \ll 1$. Wanneer $q/U \gg 1$ domineert de kwadratische Zeeman term, wat ervoor zorgt dat de Heisenberg bewegingsvergelijkingen van de velden $\hat{a}_m$ nagenoeg lineair zijn. De tijdsevolutie van het aantal spinparen vertoont in dat geval oscillaties die uiteindelijk uitdempen naar een gemiddelde waarde, zoals te zien is in figuur 3.1 b)[1]. Wanneer $q/U \ll 1$ (figuur 3.1 a)) doet zich echter sterk verschillende dynamica voor. De dynamica na de quench wordt dan namelijk gedomineerd door niet-lineaire effecten die ervoor zorgen dat in deze gevallen de oscillaties die geobserveerd worden voor $q/U \gg 1$ snel gedempt worden en in plaats daarvan meteen relaxatie naar een stationaire toestand plaatsvindt. Ondanks de sterk verschillende dynamica evolueren beide regimes na verloop van tijd wel naar een stationaire toestand, zij het een oscillerende of gerelaxeerde, met een gemiddelde waarde voor het aantal spinparen $\bar{n}_p$. Aangezien het aantal deeltjes waarmee gewerkt wordt varieert, wordt het aantal spinparen steeds uitgedrukt met een

[1] Alle dynamica behalve diegene uit de Bogoliubov beschrijving werd gereproduceerd aan de hand van code die reeds in staat was om symmetriebreking in rekening te brengen, vandaar de beperking tot een systeem met $N = 50$ deeltjes. Opnieuw wordt Lennart Fernandes bedankt voor het voorzien van de code voor het integreerbare systeem waarop kon worden verdergebouwd [3, 16].



(a) Dynamica voor een condensaat met N=50 in het regime met $q/U = 0.01$.



(b) Dynamica voor een condensaat met N=50 in het regime met $q/U = 10$.

Figuur 3.1: De volle lijn duidt de exacte oplossing aan terwijl de rode stippellijn de truncated Wigner benadering aangeeft, de grijze stippellijn de GPE dynamica en de blauwe stippellijn de dynamica in Bogoliubov beschrijving.

fractionele waarde gedefinieerd als

$$n_p = \frac{\langle \hat{a}^\dagger_\pm \hat{a}_\pm \rangle}{N}. \tag{3.1}$$

Verder vertoont de dynamica een overeenkomst met de Bogoliubov voorspelling voor vroege tijden. In het regime met $q/U \ll 1$ is dit slechts voor dynamica zeer kort na de quench en nemen niet-lineaire effecten het snel over. Voor $q/U \gg 1$ voldoet de dynamica aan de verwachting dat de Bogoliubov benadering het in dit regime beter zou doen aangezien een grote waarde voor q/U ervoor zal zorgen dat de Zeeman term domineert en de dynamica bijgevolg naar lineaire neigt. Doordat de Bogoliubov benadering de relaxatie naar een gemiddelde waarde logischerwijs niet beschrijft, doet de overeenkomst zich ook in dit regime slechts voor vroege dynamica voor.

Aangezien $N = 50$ ruim binnen het geldigheidsgebied van de truncated Wigner benadering ligt verwachten we dat deze beschrijving hier een goede benadering van de exacte oplossing zal opleveren. Voor het regime met een klein kwadratisch Zeeman effect ($q/U \ll 1$) zien we dat dit op enkele fluctuaties na wel het geval is. Voor een grote waarde voor q/U zien we echter dat truncated Wigner dynamica hier initieel wel overeenstemt en een gemiddeld eenzelfde relaxatie vertoond maar niet in staat is om de dynamica volledig correct te beschrijven. Dit geeft meteen al een indicatie dat de dynamica uit truncated Wigner niet in elk regime een even goede benadering is en dat het beschouwen van een gemiddelde in plaats van een enkele eindwaarde als relaxatiewaarde vermoedelijk nodig zal zijn bij de verdere studie van de truncated Wigner dynamica in het volgende hoofdstuk. Dat de Gross-Pitaevskii vergelijking er niet in slaagt de dynamica na de quench te beschrijven is te zien aan de vergelijkingen (1.73), als α_+ en α_- daar nul zijn, zoals het geval is in de begintoestand, dan is het rechterlid van beide vergelijkingen en dus ook de bijhorende dynamica steeds gelijk aan nul.

In de figuren is ook te zien hoe het regime waarvoor $q/U \gg 1$ duidelijk minder spinparen vertoont dan wanneer $q/U \ll 1$. Dit is opnieuw logisch vanuit het oogpunt dat een hoge waarde voor q/U een grote verschuiving van de $|m = \pm 1\rangle$ energieniveaus met zich mee zal brengen en het bijgevolg energetisch kostelijker wordt om te exciteren, waardoor een groot aantal deeltjes in de $|m = 0\rangle$ toestand zal blijven. Dit omgekeerd evenredig verband tussen de kwadratische Zeeman splitting en het aantal spinparen wanneer $n_p \ll 1$ is echter ook te verklaren vanuit de Bogoliubov benadering.

Hoewel de oscillerende stationaire toestand die geobserveerd wordt voor dit regime duidelijk geen vacuüm van Bogoliubov excitaties is, kan vlak na de quench op tijdstip $t = 0$ worden aangenomen dat de spin mixing dynamica nog niet op gang is gekomen en het condensaat zich nog volledig in de $|0\rangle$-toestand bevindt. Hierdoor kunnen we aannemen dat op dat punt de kwadratische correlaties gelijk zijn aan 0,

$$\langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\pm \rangle = \langle \hat{\delta}_+ \hat{\delta}_- \rangle = 0. \tag{3.2}$$

Dit uitdrukken in termen van de Bogoliubov quasideeltjes $\hat{b}$ via de inverse Bogoliubov transformatie,

$$\hat{b}_\pm = u^* \hat{\delta}_\pm - v \hat{\delta}_\mp^\dagger, \tag{3.3}$$

geeft dan,

$$\begin{aligned} \langle \hat{b}_\pm^\dagger \hat{b}_\pm \rangle &= \langle (u \hat{\delta}_\pm^\dagger - v^* \hat{\delta}_\mp)(u^* \hat{\delta}_\pm - v \hat{\delta}_\mp^\dagger) \rangle \\ &= |u|^2 \langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\pm \rangle - uv \langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\mp^\dagger \rangle - u^* v^* \langle \hat{\delta}_\mp \hat{\delta}_\pm \rangle + |v|^2 \langle \hat{\delta}_\mp \hat{\delta}_\mp^\dagger \rangle = |v|^2 , \end{aligned} \tag{3.4}$$

waarbij de $\langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\mp^\dagger \rangle$ correlatie ook wegvalt als gevolg van (3.2) en $\langle \hat{\delta}_\mp \hat{\delta}_\mp^\dagger \rangle = 1$ door de commutatierelaties. Het gebruik van de commutatierelaties in deze berekening toont hoe dit een puur kwantumeffect is dat niet zou optreden als de operatoren zouden commuteren. Een analoge berekening voor $\langle \hat{b}_+ \hat{b}_- \rangle$ geeft,

$$\langle \hat{b}_+ \hat{b}_- \rangle = -uv. \tag{3.5}$$

Het aantal Bogoliubov excitaties $\langle \hat{b}_\pm^\dagger \hat{b}_\pm \rangle$ kan als een constante van beweging worden beschouwd omdat de Bogoliubov transformatie de Hamiltoniaan diagonaliseerd. Dit is niet het geval voor de $\langle \hat{b}_+ \hat{b}_- \rangle$ correlatie, maar aangezien deze triviaal roteert onder tijdsevolutie kan deze wanneer een gemiddelde over de tijd genomen wordt benaderend gelijk aan 0 gesteld worden.
Nu kan aan de hand van de Bogoliubov transformatie het aantal spinparen $\langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\pm \rangle$ ook herschreven worden in termen van $\hat{b}$,

$$\langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\pm \rangle = v^2 + u^2 \langle \hat{b}_\pm^\dagger \hat{b}_\pm \rangle + v^2 \langle \hat{b}_\mp^\dagger \hat{b}_\mp \rangle + uv(\langle \hat{b}_+ \hat{b}_- \rangle + \langle \hat{b}_+^\dagger \hat{b}_-^\dagger \rangle). \tag{3.6}$$

Invullen van bovenstaande uitdrukkingen voor de situatie vlak na de quench geeft dan, na het verwaarlozen van de $\langle \hat{b}_+ \hat{b}_- \rangle$ correlatie, volgende schatting voor het aantal deeltjes in spinparen:

$$n_p = \langle \hat{\delta}_\pm^\dagger \hat{\delta}_\pm \rangle = (u^2 + v^2 + 1) \frac{v^2}{N} = \frac{(UN)^2}{2Nq(q + 2UN)}. \tag{3.7}$$

Zodat in het $q/U \gg 1$ regime met nagenoeg lineaire bewegingsvergelijkingen het aantal spinparen inderdaad schaalt als $(q/U)^{-2}$ [3, 16].

Het andere regime ($q/U \ll 1$) vertoont dit schalingsgedrag niet aangezien het aantal deeltjes in paren n_p daar convergeert naar een vaste waarde (zie sectie 3.2). De tijdsschaal waarop deze relaxatie gebeurt voor een continuüm benadering van de dynamica en verwaarloosbare q/U is [2],

$$\tilde{t} = \frac{\hbar}{U\sqrt{2N}}. \tag{3.8}$$

Met deze tijdsschaal worden ook alle figuren in dit hoofdstuk geschaald.

3.2 Veralgemeend Gibbs ensemble

Een belangrijke opmerking om te maken is dat de relaxatie die plaatsvindt in het regime met niet-lineaire dynamica niet tot de stationaire toestand leidt die men verwacht bij thermisch evenwicht, welke voor $q/U \to 0$ overeenstemt met gelijke populatie voor alle drie de toestanden ($\bar{n}_{pair} = 1/3$). Zoals in het hoofdstuk met achtergrond al kort vermeld werd heeft dit te maken met het behoud van het angulair moment langs de z-as, $\hat{S}_z = \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+ - \hat{a}_+^\dagger \hat{a}_+$. Deze symmetrie, samen met het behoud van het totaal aantal deeltjes N, maakt het systeem integreerbaar, wat invloed heeft op de relaxatie van de spin mixing dynamica. Meer bepaald voorkomt dit dat de faseruimte ergodisch wordt gesampeld waardoor de verwachte thermalisatie niet meer mogelijk is. Deze extra symmetrie in rekening nemen in het statistisch ensemble van het systeem staat echter toe om een aangepaste waarde te bepalen voor het evenwicht dat bereikt wordt na relaxatie. Dit gebeurt via een extra restrictie die door middel van een Lagrange multiplicator wordt toegevoegd aan de dichtheidsmatrix en zo de Boltzmann distributie uitbreidt naar een veralgemeend Gibbs ensemble (1.34)[1, 2, 26]. Dat specifiek voor dit systeem volgende vorm heeft,

$$\hat{\rho}_{GGE} \sim \exp\left\{-\frac{\hat{H} - B_z\hat{S}_z}{k_B T}\right\}. \tag{3.9}$$

De bijhorende nieuwe verwachtingswaarde voor $\bar{n}_p$ wanneer $q/U \to 0$, wordt dan bepaald in de limiet $q = 0$, zodat de volledige Hamiltoniaan (1.59) gereduceerd wordt tot $\hat{S}^2$, de totale spin operator. Voor gevallen waarbij de eigenwaarde $S \gg 1$ zijn, wordt de verwachtingswaarde van het paarnummer $\hat{n}_p$ bij benadering gegeven door [46]

$$\langle S, m_S | \hat{n}_p | S, m_S \rangle \approx \frac{1}{2} - \frac{S^2 - m_S^2}{4S^2}. \tag{3.10}$$

Aangezien er vertrokken wordt van een toestand waarbij alle deeltjes zich in de $|0\rangle$-toestand bevinden ($|0\rangle^{\otimes N}$), zal behoud van magnetisatie $\langle \hat{S}_z \rangle = m_S = 0$ er ook voor zorgen dat het ensemble volgende vorm verkrijgt,

$$\hat{\rho}_{GGE} \sim \sum_S |S, 0\rangle \langle S, 0| \tag{3.11}$$

aan de hand van bovenstaand matrixelement bekomt men dan dat het paarnummer voor een $|S, 0\rangle$-toestand 1/4 zal zijn, zodat ook de verwachtingswaarde het volgende oplevert voor de nieuwe relaxatiewaarde,

$$\bar{n}_p = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{GGE}\hat{n}_p] = 1/4. \tag{3.12}$$

3.3 Gefragmenteerd condensaat

We herinneren ons uit de sectie over het Penrose-Onsager criterium dat voor interagerende systemen men van een Bose-Einstein condensaat kan spreken wanneer één van de eigenwaarden in de dichtheidsmatrix macroscopisch, met andere woorden van orde 1, groot wordt. Over het algemeen verwachten we dat dit kan gebeuren voor de eigenwaarde overeenkomstig met de laagste energietoestand, aangezien deze geen limiet had voor de bezetting. Zoals al eerder vermeld werd in deze thesis is het echter mogelijk dat meerdere van deze eigenwaarden een macroscopisch grote waarde aannemen. In zo'n geval hebben we te maken met een *gefragmenteerd condensaat* [47, 48]. Voor dit systeem wordt dit duidelijk uit bovenstaande figuren maar is dit ook in te zien via een korte berekening van de gereduceerde dichtheidsmatrix. Deze wordt in de een-mode benadering gegeven door,

$$\rho_1^{(n,m)} = \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m \rangle / N \tag{3.13}$$

waarbij nu ook gedeeld is door N om een fractionele waarde te bekomen. Behoud van magnetisatie $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$ zorgt er hier voor dat de Hilbertruimte beperkt is tot toestanden waarbij het aantal deeltjes in de $|+\rangle$ en $|-\rangle$ toestanden gelijk zijn. Dit betekent dat alle toestanden van de vorm $\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{m\neq n} |\psi\rangle$, waarbij $|\psi\rangle$ deel uitmaakt van deze gereduceerde Hilbertruimte, matrixelementen $\langle \psi | \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{m\neq n} |\psi\rangle = 0$ opleveren door de orthogonaliteit van de Fock toestanden. Hierdoor blijven enkel diagonaalelementen over en verkrijgen we voor de gereduceerde dichtheidsmatrix volgende diagonaalvorm:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} n_p & 0 & 0 \\ 0 & 1-2n_p & 0 \\ 0 & 0 & n_p \end{pmatrix}. \tag{3.14}$$

Voor de grondtoestand, en de toestand die ook verwacht wordt bij ware thermalisatie, was $n_p = 1/3$ zodat $\rho_1 = \mathrm{diag}(1/3, 1/3, 1/3)$ wordt. De verwachtingswaarde voor de stationaire toestand die bereikt wordt na de plotse quench werd bepaald via het veralgemeend Gibbs ensemble en was $n_p = 1/4$, wat leidt tot $\rho_1 = \mathrm{diag}(1/4, 1/2, 1/4)$.

Om dit soort condensaat te kunnen vormen moet het systeem aan twee voorwaarden voldoen. De eendeeltjes grondtoestand moet ontaard zijn en de symmetrieën van de Hamiltoniaan moeten de vorming van een condensaat in een superpositie van deze toestanden verhinderen. Beide voorwaarden zijn in het geval van een spinor-1 condensaat voldaan, de eerste in het regime waarvoor $q/U \to 0$ en interacties domineren en de tweede door het behoud van magnetisatie. Gefragmenteerde condensaten werden voor het eerst beschreven door Nozières en Saint James in 1982 [49].

4 Dynamica voor gebroken symmetrie

In dit hoofdstuk worden de resultaten van de dynamica van het condensaat voor gebroken S_z symmetrie besproken. Behoud van deze symmetrie maakte het systeem integreerbaar, waardoor een relaxatie naar thermisch evenwicht met gelijke bezetting in de drie modes verhinderd werd. In plaats daarvan relaxeerde de dynamica naar een veralgemeende verwachtingswaarde $\bar{n}_p$ die bepaald werd met het veralgemeend Gibbs ensemble. Nu de integrabiliteit gebroken wordt door het toevoegen van de $\hat{S}_x$ term aan de Hamiltoniaan, verwachten we dat het systeem wel in staat zal zijn het thermisch evenwicht te bereiken.

Aangezien de dimensie van de Hilbertruimte voor de exacte oplossing bij gebroken symmetrie heel wat groter is dan bij behouden symmetrie ($(N+1)(N+2)/2$ tegenover $N/2+1$), zijn we echter sterk beperkt in het aantal deeltjes waarvoor we de exacte oplossing kunnen bepalen. De meeste van de simulaties zijn daarom uitgevoerd voor een gas met $N = 50$ [1].

Wat hier wel moet worden bewaakt is dat er niet met nog minder deeltjes gewerkt wordt zodat het condensaat wel voldoende groot is om een accuraat beeld te geven van de dynamica van het systeem. Zo blijkt namelijk dat de dynamica in de één-mode benadering voor een laag aantal (4-24) deeltjes sterk kan afwijken in vergelijking met die voor meer deeltjes (orde $10^2 - 10^3$) voor langere dynamica [50]. Dit is het gevolg van kwantumeffecten die de kop opsteken naarmate het systeem kleiner wordt en wordt in meer detail besproken in sectie 4.2.2.

4.1 Lineair regime

In deze sectie bekijken we hoe de dynamica voor het condensaat eruitziet in de exacte oplossing in vergelijking met de truncated Wigner benadering en Gross-Pitaevskii vergelijkingen voor een groot kwadratisch Zeeman effect waarbij $q \gg U$ is en de dynamica bij benadering lineair wordt.

Voor het eerste systeem dat beschouwd wordt nemen we $q/U = 5$ en $\Omega/U = 7$ [2], de bijhorende dynamica is te zien in figuur 4.1. Hier zien we dat net zoals in het integreerbare systeem (figuur 3.1 (b)) het condensaat in exacte oplossing oscillaties vertoont die dempen naar een oscillatie met een kleinere amplitude maar niet uitdoven. En hoewel de dynamica in de exacte oplossing vergelijkbaar is, verspreidt deze zich hier over een veel langere tijd. Dit en de aanwezigheid van de kleine fluctuaties die worden geobserveerd in de exacte oplossing[3] lijken erop te wijzen dat de dynamica een

[1] Ook de figuren uit het vorige hoofdstuk zijn voor systemen met $N = 50$, aangezien deze gereproduceerd werden met code die reeds aangepast was om symmetriebreking in rekening te nemen. Het artikel van Fernandes et al. [3] werkte daar met $N = 400$ deeltjes, maar de geobserveerde dynamica is dezelfde.

[2] De waarde voor U is vanaf nu altijd gelijk aan 1.

[3] Deze zijn vooral zichtbaar voor vroege dynamica in het onderste paneel van figuur 4.1.

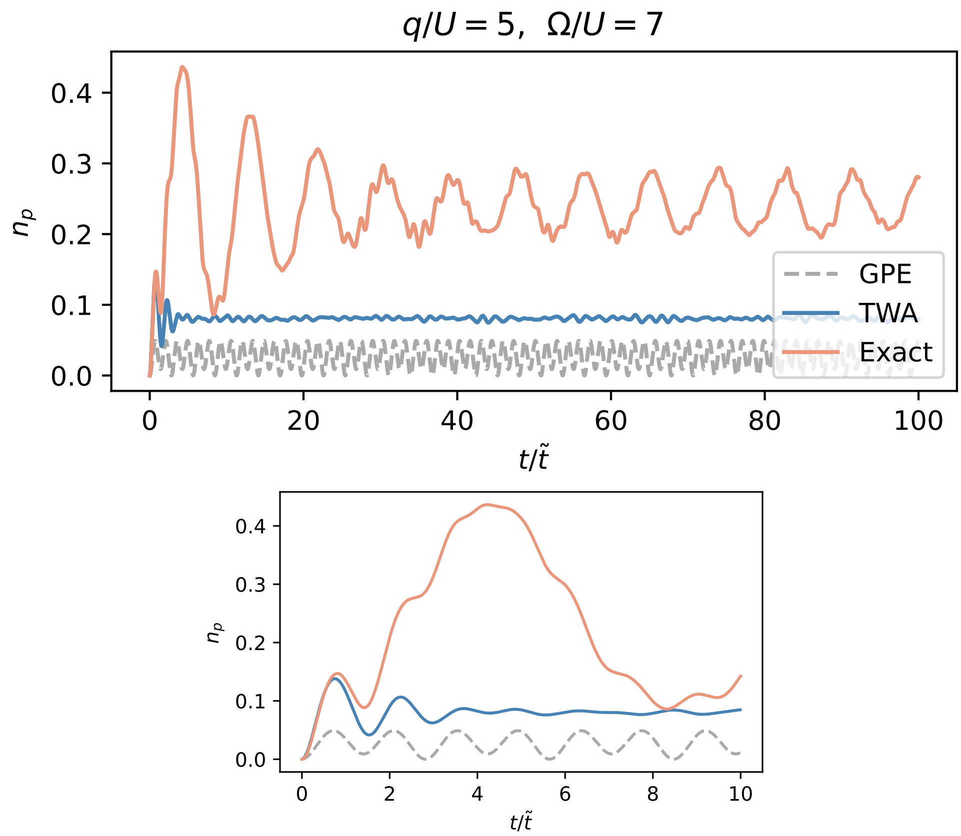
superpositie van beide effecten is met oscillaties uit het integreerbare systeem met een periode van ongeveer $\tilde{t}$, die zichtbaar zijn in de Gross-Pitaevskii en truncated Wigner dynamica en de kleine fluctuaties lijken te veroorzaken in de exacte oplossing, gemoduleerd met tragere oscillaties afkomstig van het lineaire Zeemaneffect. Daarnaast is de fractie aan spinparen hier ongeveer 10 keer groter in de exacte oplossing dan wanneer de symmetrie behouden was, wat deze zelfs in de buurt brengt van de verwachte relaxatiewaarde uit het veralgemeend Gibbs ensemble. Uit de formule voor n_p die werd afgeleid uit de Bogoliubov benadering (3.7) zagen we dat het aantal spinparen schaalt als $(q/U)^{-2}$, zodat een q/U die een factor 2 kleiner is slechts 4 keer zoveel spinparen zou opleveren. We zien dat dit in de truncated Wigner benadering echter wel nog een goede schatting van de schaling geeft.

Wat zeer opmerkelijk is, is het drastische verschil tussen de truncated Wigner benadering en de exacte oplossing voor dit regime. De truncated Wigner dynamica voorspelt minder spinparen en slechts initieel enkele oscillaties voordat deze meteen uitdoven naar een waarde die zelfs niet gemiddeld overeenstemt met die van de exacte oplossing. Zo zien we in de figuur waarbij ingezoomd is op de vroege dynamica hoe deze slechts voor de eerste oscillatie overeenstemmen en daarna van elkaar afwijken. Dit sterke verschil in dynamica van de exacte oplossing en truncated Wigner benadering zegt ons dat deze benadering in sommige regimes niet in staat zal zijn de dynamica correct te beschrijven nu de symmetriebrekende term geïmplementeerd is. De bijdrage van het lineaire Zeemaneffect heeft hier duidelijk een grote invloed op de exacte oplossing. Hoewel de vorm van de dynamica vergelijkbaar blijft met wat eerder geobserveerd werd voor dit regime, zien we dat deze onder invloed van de bijdrage van Ω/U nu veel tragere oscillaties vertoont en dat het aantal spinparen zelfs losbreekt van het omgekeerd evenredig verband tussen q/U dat voorspeld werd uit de Bogoliubov benadering. In plaats daarvan vindt een evolutie plaats naar een gemiddelde relaxatiewaarde die rond de verwachting uit het veralgemeend Gibbs ensemble ligt in dit geval. De truncated Wigner benadering lijkt minder effect te ondervinden van de symmetriebrekende term, deze voldoet wel aan de schaling die verwacht wordt vanuit de Bogoliubov beschrijving en relaxeert, zoals ook te verwachten is voor een kleinere waarde van q/U, sneller dan het systeem met een grote bijdrage van het kwadratisch Zeemaneffect dat in het vorige hoofdstuk over het integreerbare systeem besproken werd.

Daarnaast heeft breking van de S_z symmetrie ervoor gezorgd dat nu ook vanuit de Gross-Pitaevskii vergelijkingen spin mixing de kans heeft om op gang te komen. Dat deze hier wel in staat zijn om het spin mixing karakter van de dynamica te laten zien is te wijten aan het feit dat de symmetriebrekende term ervoor gezorgd heeft dat zelfs voor een begintoestand met α_+ en α_- gelijk aan nul het rechterlid in de Gross-Pitaevskii vergelijkingen voor de dynamica (2.21) nu niet meer steeds nul is.

4.2 Sterk interagerend regime

Het systeem met een groot kwadratisch Zeemaneffect uit de vorige sectie toonde ons dat er in exacte oplossing nog steeds overeenkomst was met de dynamica die geobserveerd werd voor het integreerbare systeem maar waarschuwde ook dat de truncated Wigner benadering in sommige regimes geen goede benadering van de dynamica meer is nu de symmetriebrekende interactie is toegevoegd aan het systeem. Ondanks dat dit een belangrijke observatie is om in het achterhoofd te houden, zijn we echter meer geïnteresseerd in systemen met een klein kwadratisch Zeemaneffect aangezien dit ons met $U \gg q$ in het sterk interagerende regime brengt dat dynamica oplevert waarin thermalisatie kan plaatsvinden.



Figuur 4.1: Dynamica voor een condensaat met een groot kwadratisch Zeemaneffect: $N = 50$, $q/U = 5$ en $\Omega/U = 7$ (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De volle roze lijn duidt hier de exacte oplossing aan, de volle blauwe lijn de dynamica in truncated Wigner benadering en de grijze stippellijn de Gross-Pitaevskii dynamica.

4.2.1 Truncated Wigner benadering voor veel deeltjes

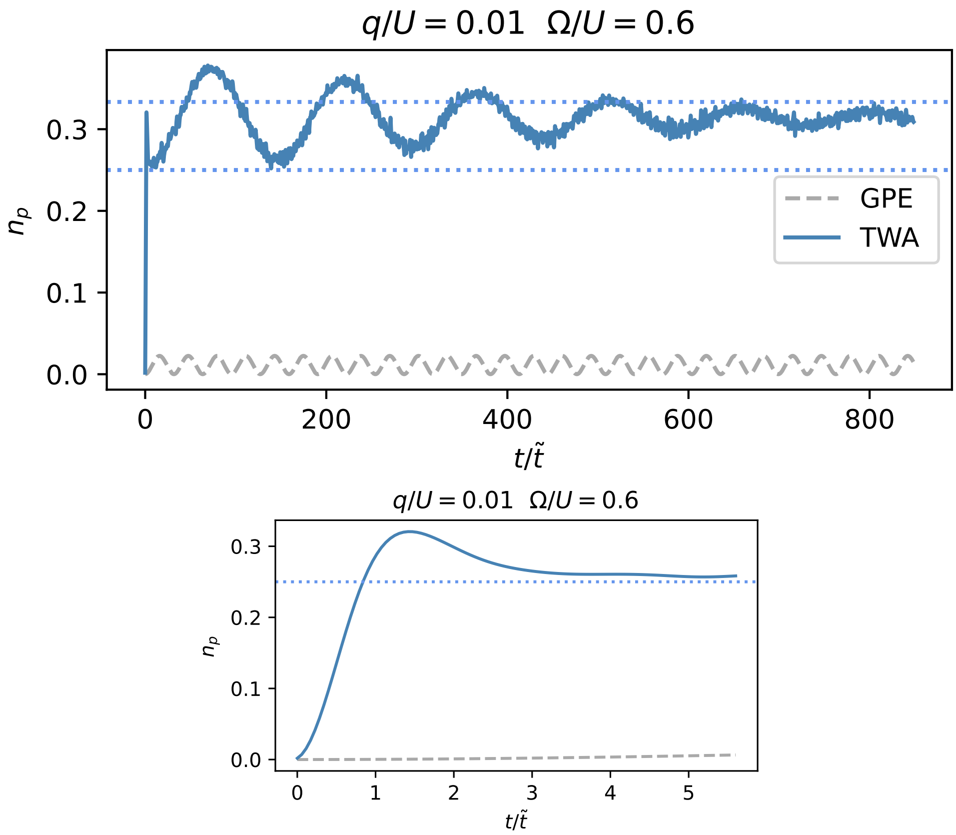
We starten deze sectie met het bekijken van de dynamica voor condensaten met $N = 400$ in truncated Wigner benadering. Zoals in het begin van dit hoofdstuk namelijk al vermeld werd is de grootte van het systeem sterk beperkt voor de exacte oplossing. Voor zo'n kleine systemen krijgt de dynamica te maken met kwantumeffecten zoals revivals (zie verder) die de exacte oplossing sterk zullen beïnvloeden en truncated Wigner dynamica door zijn klassieke karakter niet zal kunnen beschrijven. Om een idee te krijgen van de dynamica van het condensaat wanneer het geen invloed ondervindt van dit soort kwantumeffecten, bekijken we de truncated Wigner benadering voor systemen met 400 deeltjes. We zijn ons hierbij bewust van het feit dat de truncated Wigner benadering soms geen goede beschrijving is van de dynamica, zoals we observeerden in de vorige sectie. In de volgende sectie waar de drie beschrijvingen vergeleken worden zullen we echter zien dat deze benadering voor een klein kwadratisch Zeemaneffect (kleine waarde voor q/U) geen drastisch verschil in dynamica oplevert. Daarnaast zagen we ook bij het integreerbare systeem dat de truncated Wigner dynamica een betere benadering was van de exacte oplossing voor een klein kwadratisch Zeemaneffect en voldoet $N = 400$ nog ruimer aan de geldigheidsvoorwaarde van de truncated Wigner benadering. Enige voorzichtigheid is dus wel op zijn plaats maar we verwachten dat deze benadering voor een groot aantal deeltjes ons wel een idee kan geven van wat we kunnen verwachten voor de dynamica nu de integrabiliteit gebroken is.

We starten met een kleine waarde van $\Omega/U = 0.6$ voor de storing van het lineaire Zeemaneffect in figuur 4.2. Als we daar inzoomen om de vroege dynamica weer te geven, zien we dat ook dit systeem een initiële relaxatie naar $n_p = 1/4$ vertoond in overeenkomst met het systeem waarvoor de S_z symmetrie behouden is. Daarna komen echter oscillaties op gang die uitdoven over een aanzienlijk langere tijdsschaal dan voor de initiële dynamica en relaxeren richting de ware thermalisatie waarbij verwacht wordt dat 2/3 van de deeltjes zich in paren bevinden of anders gezegd het aantal paren overeen zal komen met 1/3. En dit is ook het geval, een gemiddelde nemen over de oscillerende dynamica levert een waarde op van ongeveer $\bar{n}_p = 0.32$ [4]. We nemen hier een gemiddelde van de dynamica in plaats van een enkele eindwaarde als relaxatiewaarde omdat de oscillaties nog niet volledig zijn uitgedoofd en de simulatietijd moest worden beperkt. Opmerkelijk is dat hoewel er een duidelijke evolutie richting het ware thermisch evenwicht plaatsvindt, dit nog niet volledig wordt bereikt.

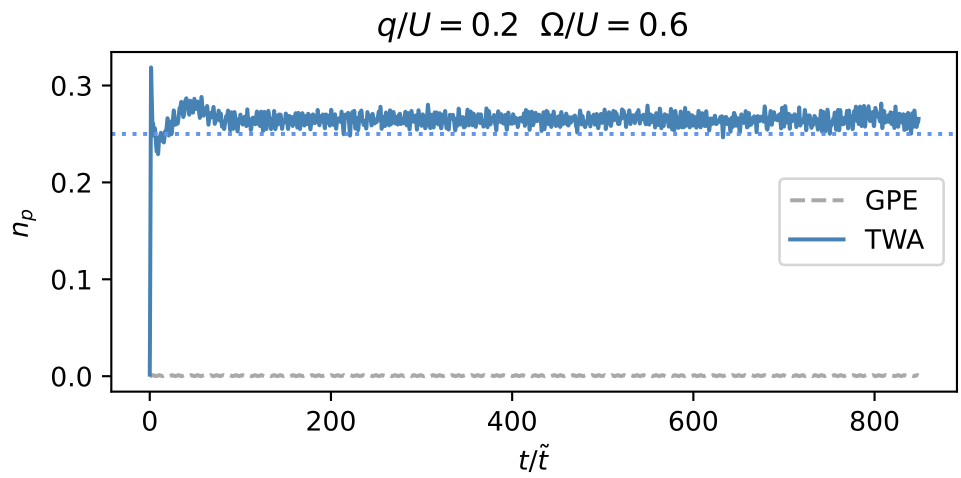
Voor dit soort bijna integreerbare systemen waarbij de integrabiliteit gebroken wordt door slechts een kleine storing stemt dit inderdaad overeen met de verwachte dynamica. Men verwacht in zo'n geval namelijk een relatief snelle relaxatie naar een veralgemeende stationaire toestand die nog bepaald wordt door het integreerbare systeem, gevolgd door een veel tragere relaxatie naar het echte thermisch evenwicht. Voor een systeem geprepareerd in een niet-evenwichtstoestand, bijvoorbeeld door een kwantum quench zoals hier het geval is, zal het systeem voor een voldoende zwakke storing ($\hat{H}' = \Omega\hat{S}_x$), niet meteen voelen dat de integrabiliteit gebroken is. Dit zorgt ervoor dat het effect van de symmetriebrekende term voor vroege dynamica nog klein is, waardoor de initiële relaxatie naar de verwachtingswaarde bepaald via het veralgemeende Gibbs ensemble plaatsvindt. Voor langere dynamica wordt verwacht dat het effect van de symmetriebreking wel sterk genoeg wordt om het systeem te relaxeren naar thermisch evenwicht. Dit fenomeen noemt men prethermalisatie [27].

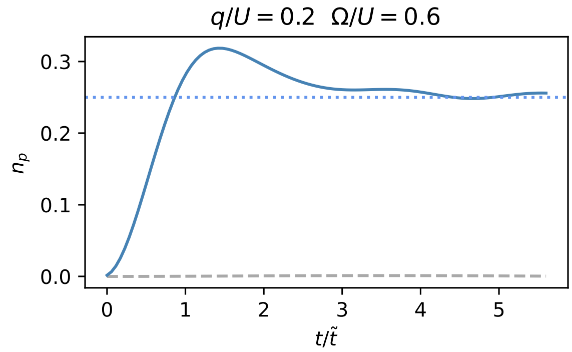
Wanneer q een grootteorde toeneemt (figuur 4.3) zien we echter dat het effect van de symmetriebreking voor dezelfde waarde van Ω/U niet meer sterk genoeg is om tot een relaxatie richting ware thermalisatie te leiden. We observeren nog steeds een vroege relaxatie kort na de quench, maar de daaropvolgende oscillatie lijkt slechts heel kort (of afhankelijk van de waarde voor q/U zelfs niet)

[4] De gemiddeldes worden steeds zo genomen dat een eventuele prethermalisatie wordt uitgesloten zodat enkel een gemiddelde van de tweede relaxatie wordt bekomen.



Figuur 4.2: Dynamica voor een condensaat met een klein kwadratisch Zeemaneffect: $N = 400$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 0.6$ voor de truncated Wigner benadering en Gross-Pitaevskii vergelijkingen. (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De volle blauwe lijn duidt hier de truncated Wigner benadering aan en de grijze stippellijn de GPE dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan en in het bovenste paneel is ook $n_p = 1/3$ voor ware thermalisatie toegevoegd. De gemiddelde waarde voor de dynamica na prethermalisatie is $\bar{n}_p = 0.32$.

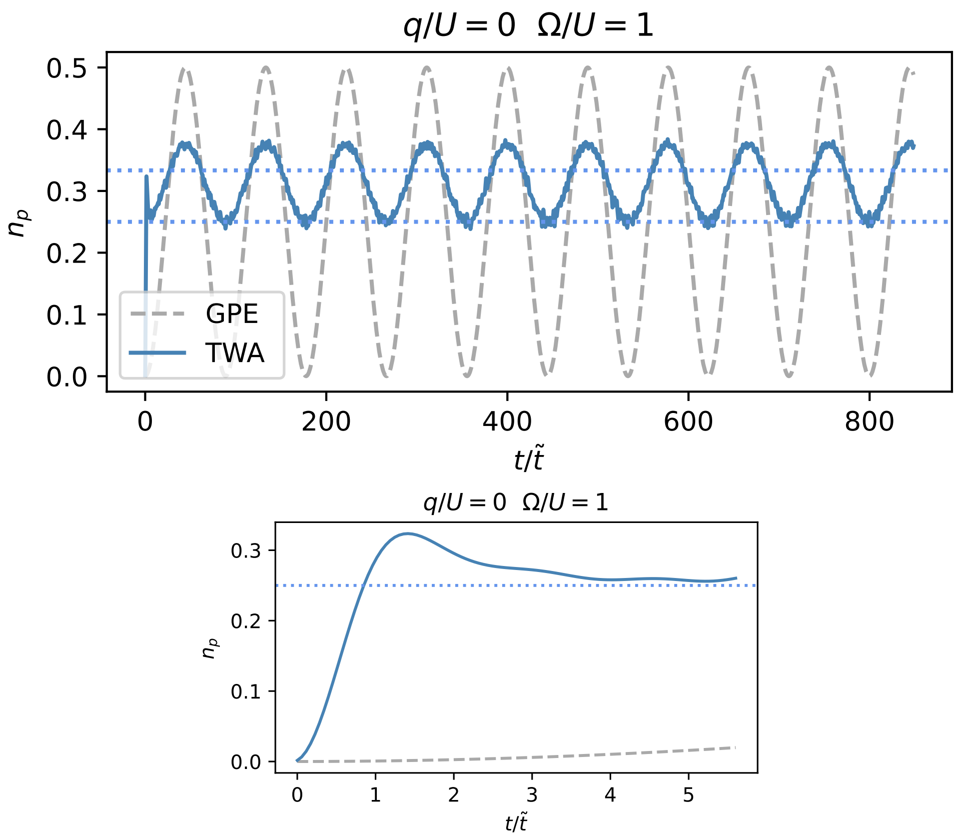




Figuur 4.3: Dynamica voor een condensaat met een klein kwadratisch Zeemaneffect: $N = 400$, $q/U = 0.2$ en $\Omega/U = 0.6$ voor de truncated Wigner benadering en Gross-Pitaevskii vergelijkingen. (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De volle rode lijn duidt hier de truncated Wigner benadering aan en de grijze stippellijn de GPE dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan. De gemiddelde waarde voor de dynamica na prethermalisatie is $\bar{n}_p = 0.26$.

op gang te komen voordat de integreerbare dynamica het terug overneemt en het systeem naar een tweede relaxatie opnieuw rond de veralgemeende verwachtingswaarde $n_p = 1/4$ (specifiek voor dit geval $\bar{n}_p = 0.26$) leidt. Dit geeft al een eerste indicatie dat de verhouding tussen q/U en Ω/U een belangrijke factor speelt in de vraag of de symmetriebreking in staat zal zijn om het systeem tot thermalisatie te brengen.

Verder beschouwen we het effect van de symmetriebrekende term als de kwadratische Zeeman term wordt afgezet ($q/U = 0$) en de dynamica dus enkel afhankelijk zal zijn van de toegevoegde term $\Omega \hat{S}_x$ en de interactie bij bi-atomaire botsingen tussen deeltjes ($\frac{U}{2}\hat{\mathbf{S}}^2$). De dynamica voor dit regime is afgebeeld in figuur 4.4. Hierbij zien we duidelijk hoe de Gross-Pitaevskii dynamica, in tegenstelling tot voor het systeem met behouden symmetrie, wel op gang komt en zelfs Rabi oscillaties [51] vertoont. Dit lijkt erop te wijzen dat de bijdrage van q/U hier anders een soort dempend effect heeft dat niet alleen zorgt voor een kleinere amplitude van de Gross-Pitaevskii oscillaties maar er, nog belangrijker, ook in de truncated Wigner dynamica toe leidt dat de oscillaties uitdoven tot thermalisatie. We zien dat ook hier de truncated Wigner benadering voor vroege dynamica vergelijkbaar is met die voor het systeem waar de S_z symmetrie behouden. Daarna treden persistente oscillaties op met dezelfde frequentie als die in de gemiddeld veld benadering (GPE) maar een kleinere amplitude. Hierbij merken we op dat deze oscillaties een duidelijke evenredigheid vertonen met Ω/U. Voor dit systeem met $\Omega/ = 1$ worden net geen tien periodes waargenomen voor de beschouwde tijd en ook in figuur 4.2 is dit verband op te merken, daar telt



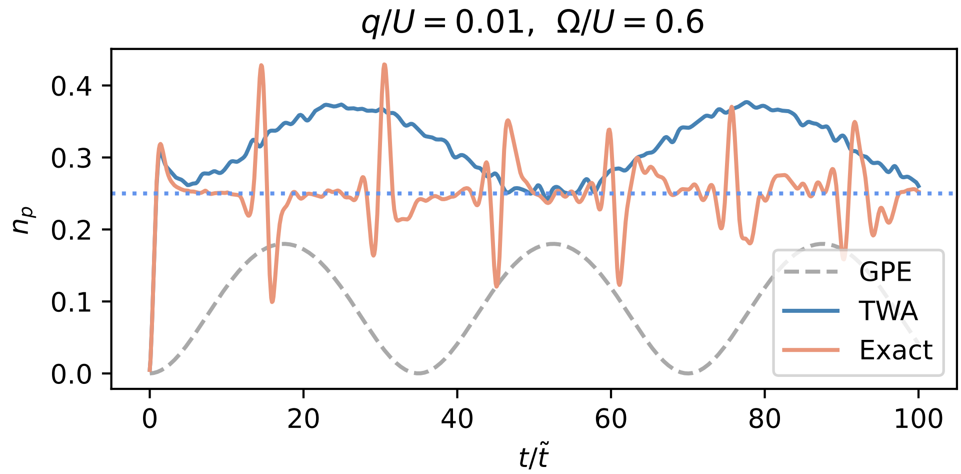
Figuur 4.4: Dynamica voor een condensaat met een klein kwadratisch Zeemaneffect: $N = 400$, $q/U = 0$ en $\Omega/U = 1$ voor de truncated Wigner benadering en Gross-Pitaevskii vergelijkingen. (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De volle blauwe lijn duidt hier de truncated Wigner benadering aan en de grijze stippellijn de GPE dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan en in het bovenste paneel is ook $n_p = 1/3$ voor ware thermalisatie toegevoegd. De gemiddelde waarde voor de dynamica na prethermalisatie is $\bar{n}_p = 0.31$.

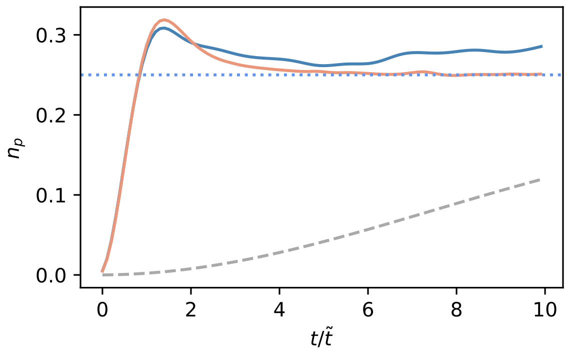
men voor $\Omega/U = 0.6$ bijna zes periodes over dezelfde tijd. Er vindt voor dit regime geen tweede relaxatie plaats maar de oscillaties centreren zich wel rond een gemiddelde dichtbij de verwachte thermalisatiewaarde ($\bar{n}_p = 0.31$). De oscillaties die zich voordoen voor een voldoende grote invloed van de symmetriebrekende term zijn het gevolg van spinprecessie in het aangelegd magneetveld [51].

4.2.2 Vergelijking tussen de exacte oplossing en truncated Wigner

In dit onderdeel bekijken we de dynamica in exacte oplossing en vergelijken deze met die in truncated Wigner benadering. Hierbij zijn we nu voor lange dynamica beperkt tot een systeem van $N = 50$ deeltjes.

We starten opnieuw met een kleine waarde voor Ω/U en bouwen vervolgens op naar grotere waarden om de invloed van symmetriebreking in verschillende regimes te beschouwen. In figuur 4.5 is te zien hoe de exacte oplossing hier na de initiële relaxatie naar $n_p = 1/4$ sterk verschillende dynamica vertoont in vergelijking met de truncated Wigner benadering. Deze wordt in de exacte oplossing gevolgd door oscillaties die sterk verschillen van die in de truncated Wigner dynamica en die in tegenstelling tot de benaderende dynamica ook niet relaxeren naar een waarde richting de ware thermalisatie, maar eerder blijven oscilleren rond de prethermalisatie verwachtingswaarde.





Figuur 4.5: Dynamica voor een condensaat met een klein Zeemaneffect $N = 50$, $q/U = 5$ en $\Omega/U = 7$ (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De gemiddeldes voor de dynamica na initiële relaxatie zijn hier $\bar{n}_p = 0.25$ en $\bar{n}_p = 0.31$ voor respectievelijk de exacte oplossing en truncated Wigner benadering. De volle roze lijn duidt hier de exacte oplossing aan, de volle blauwe lijn de dynamica in truncated Wigner benadering en de grijze stippellijn de Gross-Pitaevskii dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan.

De exacte oplossing heeft als algemeen gemiddelde voor de dynamica na prethermalisatie namelijk $\bar{n}_p = 0.25$. De oscillaties die zich voordoen in de exacte oplossing zijn afkomstig van een kwantumeffect dat zich voordoet in kleinere systemen en door het klassieke karakter van truncated Wigner niet kan worden beschreven in die benadering. Deze revivals worden verder in meer detail besproken.

Voor truncated Wigner dynamica zien we dat na de initiële relaxatie zich zeer trage oscillaties voordoen waarvan de gemiddelde waarde niet overeenstemt met de exacte oplossing en die daarnaast op deze tijdsschaal nog geen neiging tot een echte relaxatie lijken te vertonen. Terwijl het gemiddelde voor de exacte oplossing zoals hierboven al vermeld werd $\bar{n}_p = 0.25$ is, bekomen we in truncated Wigner benadering een gemiddelde van $\bar{n}_p = 0.31$. Uit deze gemiddeldes is duidelijk dat de dynamica van de twee beschrijvingen niet naar dezelfde waarde relaxeert. De exacte oplossing lijkt nog te blijven hangen rond de eerste relaxatiewaarde terwijl de truncated Wigner dynamica wel in staat is om een relaxatie richting de verwachte thermalisatiewaarde te vertonen[5]. Dit toont dat de waarde voor Ω/U niet sterk genoeg is om het systeem ook in de exacte oplossing tot thermalisatie te leiden en de bijdrage van q/U dus nog domineert.

Dat dezelfde waarde voor Ω/U geen voldoende grote storing vormt om de integrabiliteit te bereken en het systeem tot ware thermalisatie te brengen voor een kleiner aantal deeltjes is niet zeer verbazingwekkend. Het is namelijk geweten dat de grote van de storing die nodig is om de integrabiliteit van een systeem te breken exponentieel daalt voor een stijgend aantal deeltjes [31]. Dat er een grotere storing vereist is voor dit kleinere systeem was dus wel te verwachten. Wat echter wel opmerkelijk is, is dat de truncated Wigner dynamica zich wel al losbreekt van de initiële relaxatie en richting thermisch evenwicht begeeft, terwijl de exacte oplossing hier duidelijk nog niet toe in staat is voor deze waarde van Ω/U.

Aangezien we observeren dat de truncated Wigner benadering een neiging lijkt te hebben tot oscillerende dynamica (met een eventueel daaropvolgende relaxatie) en de exacte oplossing voor een beperkte systeemgrootte te maken krijgt met revivals die de dynamica sterk beïnvloeden, zijn we vooral geïnteresseerd in of deze gemiddeld dezelfde relaxatiewaarden vertonen.

Revivals

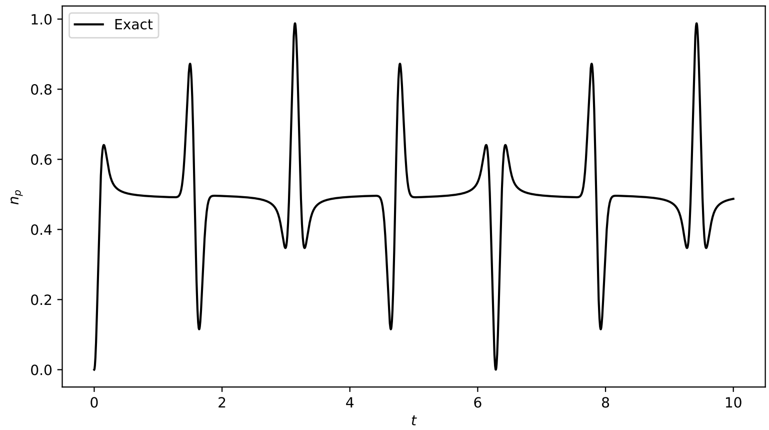
Zoals in sectie 3.1 over de spin mixing dynamica van het condensaat met behouden symmetrie reeds vermeld, werd voor het regime met $q/U \ll 1$ geobserveerd dat de dynamica na de quench gedomineerd werd door nonlineaire effecten die ervoor zorgden dat een snelle relaxatie naar de stationaire toestand voorspeld door het veralgemeend Gibbs ensemble plaatsvond. Wanneer we de dynamica iets langer laten doorlopen voor $q/U = 0$[6] (figuur 4.6) zien we echter een bijkomend effect opduiken waarvan de dynamica zich cyclisch lijkt te herhalen. Wanneer spin mixing na de quench op gang komt zal het condensaat dat zich initieel volledig in de $|0\rangle$-toestand bevindt, snel evalueren naar de prethermalisatie toestand waarin de bezetting van de de drie spinmodes overeenkomt met

$$\frac{N_{-1}}{N} : \frac{N_0}{N} : \frac{N_{+1}}{N} \approx= 0.25 : 0.5 : 0.25. \tag{4.1}$$

Na deze metastabiele toestand komen echter opnieuw oscillaties in de populaties op gang die uiteindelijk de cyclus eindigen door terug de initiële toestand te bereiken met alle deeltjes in de $|m = 0\rangle$ toestand op tijdstip $t = 2\pi$, om daarna de cyclus opnieuw te beginnen [50].

[5] De relaxatiewaarde voor de truncated Wigner dynamica is hier een gemiddelde van de oscillaties maar er wordt, door de gelijkenissen die de dynamica vertoont met figuur 4.2, verwacht dat deze ook zal thermaliseren. Enkel op een veel langere tijdsschaal door het kleiner aantal deeltjes.

[6] Dit is geen effect specifiek aan $q/U = 0$, $q/U = 0.01$ vertoond hetzelfde gedrag.



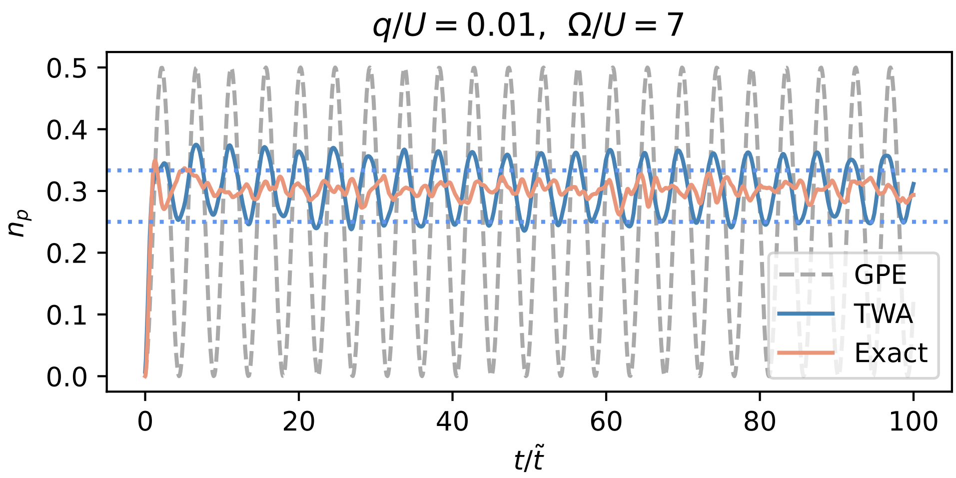
Figuur 4.6: Dynamica voor een condensaat met $N = 50$, $q/U = 0$ en $\Omega/U = 0$.

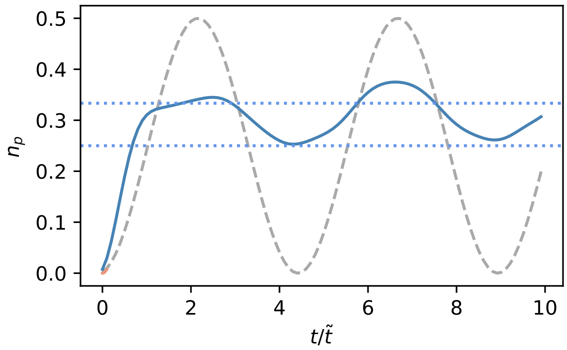
Dit soort effecten worden ook wel (kwantum) revivals genoemd [52, 53]. Revivals zijn een fase-effect waarbij de dynamica van het systeem na verloop van tijd, als gevolg van de constructieve interferentie tussen een groot aantal eigenmodes, een periodische revival (en collapse) van de initiële fase vertoont. Een simpele analogie [54] die vaak gebruikt wordt ter illustratie van de tijdsafhankelijkheid van de kwantumtoestand die tot dit gedrag leidt is het vergelijken van de energie eigentoestanden en hun bijhorende tijdafsafhankelijke factoren ($\exp(-iE_n t/\hbar)$) met een groep renners of raceauto's op een circuit. De verandering van de spreiding van het golfpakket die de revival (en collapse) effecten met zich meebrengt kan dan gerelateerd worden aan verschillen in snelheid. De klassieke periodiciteit komt zo overeen met het aantal rondes die de raceauto's maken op het circuit. Het kwantumeffect doet zich echter voor bij langere tijden. Initieel zullen de renners of raceauto's zich door hun verschil in snelheid uitspreiden en zijn er gedurende een bepaalde tijd geen groeperingen of correlaties meer aanwezig, wanneer de snellere auto's of renners hun mededeelnemers echter één of meerdere malen dubbelen, kunnen bepaalde patronen ontstaan die dan overeenstemmen met de revivals die worden waargenomen[7] [52]. We beperken ons hier tot het concept, maar voor meer informatie over de structuur van revivals en hoe deze tot stand komen wordt verwezen naar een zeer toegankelijk artikel van Bluhm et al. [55]. Hoe groter en onregelmatiger het systeem en dus hoe meer beschikbare toestanden er zijn, hoe langer de revivaltijd en dus hoe langer het duurt voor zo'n effecten de kop opsteken. Het feit dat we daar in het verkleinde systeem mee te maken hebben is dus niet verbazingwekkend. Dit kwantumeffect verklaart de dynamica die geobserveerd werd in figuur 4.5, waar inderdaad een cyclische herhaling van pieken in dynamica te zien was. De invloed van deze revivals vermindert naarmate de waarde voor Ω/U of het aantal deeltjes N wordt opgedreven, maar dit staaft wel de keuze om voor dit soort dynamica gemiddelde waardes te beschouwen.

Aangezien dit een puur kwantumeffect is, is het dan ook logisch dat de truncated Wigner benadering, die nog steeds een klassieke benadering van de kwantumfluctuaties is, niet in staat is om dit soort dynamica te vertonen.

In het volgende systeem voeren we de waarde voor Ω/U op met als doel een competitieve bijdrage van de symmetriebrekende term te verkrijgen die voldoende invloed heeft op de dynamica om het systeem tot thermalisatie te leiden. Zoals hierboven reeds besproken verwachten we dat hier in het kleinere systeem met $N = 50$ deeltjes een grotere storing van Ω/U voor zal nodig zijn. Verschillende simulaties wezen uit dat de bijdrage van het lineaire Zeemaneffect, wanneer het kwadratische

[7]Ook kleinere groepen kunnen ontstaan, deze stemmen dan overeen met fractionele revivals van de dynamica.





Figuur 4.7: Dynamica voor een condensaat met een klein Zeemaneffect $N = 50$, $q/U = 5$ en $\Omega/U = 7$ (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). Het gemiddelde voor de dynamica na de initiële piek is hier voor zowel de exacte oplossing als de truncated Wigner benadering $\bar{n}_p = 0.30$. De volle roze lijn duidt hier de exacte oplossing aan, de volle blauwe lijn de dynamica in truncated Wigner benadering en de grijze stippellijn de Gross-Pitaevskii dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan en in het bovenste paneel is ook $n_p = 1/3$ voor ware thermalisatie toegevoegd.

effect klein is, een voldoende grote bijdrage heeft om de dynamica zodanig te beïnvloeden dat deze evolueert richting thermisch evenwicht vanaf $\Omega/U \approx 5$. Om dit regime te bespreken bekijken we het systeem voor $N = 50$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 7$.

Zo zien we in figuur 4.7 dat, vergelijkbaar met het regime zonder kwadratisch Zeemaneffect uit de vorige sectie, persistente oscillaties optreden in de truncated Wigner benadering. Voor de Gross-Pitaevskii dynamica worden opnieuw Rabi oscillaties [51] geobserveerd met een frequentie die nagenoeg overeen lijkt te komen met die voor de oscillaties in de truncated Wigner benadering, aangezien pas op latere tijdstippen duidelijk wordt dat deze niet volledig samenlopen. De oscillaties in truncated Wigner benadering vertonen opnieuw een kleinere amplitude dan die uit de Gross-Pitaevskii vergelijkingen maar dempen ook in dit regime niet uit naar thermalisatie, in plaats daarvan centreren ze zich rond $\bar{n}_p = 0.30$.

Het feit dat de truncated Wigner benadering niet relaxeert maar rond de verwachte waarde voor thermalisatie blijft oscilleren is te wijten aan het kwadratisch Zeeman effect dat in dit regime niet meer sterk genoeg is in verhouding met Ω/U. Zo zagen we in de vorige sectie waar de truncated Wigner dynamica voor veel deeltjes werd besproken dat een gebalanceerde verhouding tussen q/U en Ω/U oscillaties opleverde die relaxeren naar thermisch evenwicht. Wanneer het kwadratisch Zeemaneffect echter wordt afgezet, of zoals in dit geval niet voldoende invloed heeft, treden persistente oscillaties op door de spin precessie van het magneetveld. Dit geeft hier dus een indicatie dat voor dit regime het lineaire Zeemaneffect de dynamica domineert. Het enige effect van q/U lijkt het kleine verschil in oscillatiefrequenties te zijn, waar deze in het regime met enkel een waarde voor Ω/U en $q/U = 0$ hetzelfde lijken te zijn.

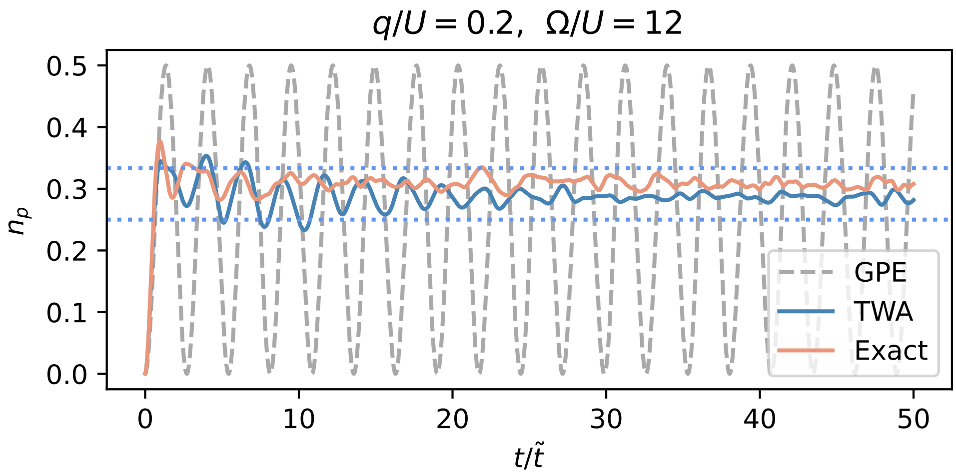
Ondanks dat de truncated Wigner benadering nog steeds sterkere oscillaties vertoont dan de exacte oplossing stemmen de gemiddeldes van beide beschrijvingen wel overeen. Het gemiddelde nemen van de dynamica na de eerste relaxatie levert voor de exacte oplossing namelijk ook $n_p = 0.30$. De grotere waarde voor Ω/U zorgt er dus inderdaad voor dat het systeem nu kan losbreken van de verwachtingswaarde uit het veralgemeend Gibbs ensemble voor het integreerbare systeem en een nieuwe (oscillerende) stationaire toestand bereikt die dichter ligt bij thermisch evenwicht. We merken echter opnieuw op dat de verwachte $n_p = 1/3$ niet volledig bereikt wordt.

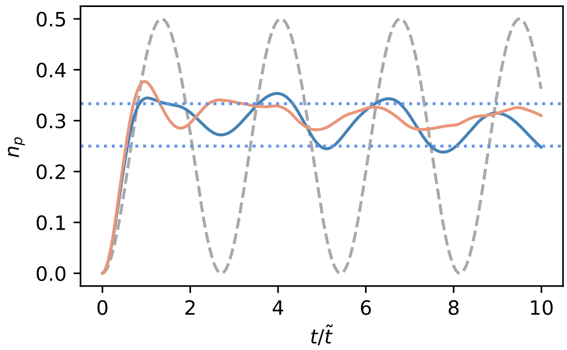
De kleine fluctuaties die voor de exacte oplossing nog te zien zijn lijken overblijfsels van revivals. Zoals eerder vermeld duiken de revivals op als gevolg van het beschouwen van een kleiner systeem, deze zijn echter niet enkel afhankelijk van het aantal deeltjes N in het systeem. De revivaltijd is namelijk afhankelijk van het spectrum van de Hamiltoniaan dat natuurlijk ook afhankelijk is van de parameters in de Hamiltoniaan. Het breken van de integrabiliteit verstoort de regelmatigheid van het spectrum en zorgt op die manier voor meer mogelijke frequenties en bijgevolg ook een langere revivaltijd. Hierdoor is het inderdaad logisch dat een sterkere bijdrage van de symmetriebrekende term het effect van revivals vermindert.

Prethermalisatie

Zoals in de vorige sectie werd besproken verwachten we dat voor een kleine storing van Ω/U het systeem nog niet meteen voelt dat de integrabiliteit gebroken is er kort na de quench nog een eerste relaxatie naar de verwachtingswaarde uit het veralgemeend Gibbs ensemble plaatsvindt. Dit was ook wat steeds geobserveerd werd in de vorige sectie bij de verschillende gevallen in truncated Wigner en het systeem met $N = 50$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 0.6$ waarbij de truncated Wigner dynamica en exacte oplossing vergeleken werden (figuur 4.5). Voor het nieuwe regime met een grotere waarde voor Ω/U dat hierboven besproken werd, is dit echter niet meer het geval. Zoals te verwachten was voor een sterkere invloed van het lineaire Zeemaneffect, zien we hier (figuur 4.7) dat het systeem direct een invloed ondervindt van de symmetriebreking. Het prethermalisatieplateau verdwijnt en hoewel er in de exacte oplossing na de eerste piek nog kort een vermindering in het aantal spinparen geobserveerd wordt, bereikt deze niet langer de verwachtingswaarde van de veralgemeende stationaire toestand uit het Gibbs ensemble ($\bar{n}_p = 1/4$). Het effect is, zoals ook al eerder het geval was, nog sterker te zien in de truncated Wigner benadering, die nu ook voor vroege dynamica meer afwijkt van de exacte oplossing en meteen begint te oscilleren.

In het laatste systeem dat besproken wordt trachten we een balans te vinden tussen het kwadratisch en lineair Zeemaneffect. Deze balans leek eerder al aanwezig in de dynamica voor een systeem met $N = 400$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 0.6$ (figuur 4.2) waarbij we in truncated Wigner benadering de verwachte dynamica met zowel een initiële prethermalisatie als een relaxatie naar thermisch evenwicht observeerden. We zagen echter in figuur dat een systeem met dezelfde waarde voor de interactieparameters maar een verschillend aantal deeltjes veel tragere dynamica opleverde (figuur 4.5). In een poging een regime te vinden waar beide effecten een competitieve bijdrage leveren doen we een korte berekening. We baseren ons op de gekende tijdsschaal voor relaxatie wanneer het systeem met behouden S_z symmetrie beschouwd wordt. In een continuüm benadering voor de dynamica in de limiet met verwaarloosbare q/U was deze [2, 16, 56]:





Figuur 4.8: Dynamica voor een condensaat met een klein Zeemaneffect $N = 50$, $q/U = 0.2$ en $\Omega/U = 12$ (boven: volledige dynamica, onder: vroege dynamica). De gemiddeldes voor de dynamica na de initiële piek zijn hier $\bar{n}_p = 0.31$ en $\bar{n}_p = 0.29$ voor respectievelijk de exacte oplossing en truncated Wigner benadering. De volle roze lijn duidt hier de exacte oplossing aan, de volle blauwe lijn de dynamica in truncated Wigner benadering en de grijze stippellijn de Gross-Pitaevskii dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan en in het bovenste paneel is ook $n_p = 1/3$ voor ware thermalisatie toegevoegd.

$$\tilde{t} = \frac{\hbar}{\sqrt{2NU}}. \tag{4.2}$$

We weten dat $\hbar$/tijd de dimensie van energie heeft en bekomen hieruit de energieschaal voor interactieparameter q,

$$\sqrt{2N}U \approx qN. \tag{4.3}$$

Voor 50 deeltjes is $\sqrt{2N}U = 10$, wat ons een waarde $q/U = 0.2$ oplevert[8]. Om een bijhorende waarde voor Ω/U te bekomen werd 0.6, de waarde voor Ω/U uit het systeem met 400 deeltjes, vermenigvuldigd met dezelfde factor als de overgang van $q/U = 0.01$ naar $q/U = 0.2$ om de onderlinge verhouding tussen de interactieparameters te behouden. Op deze manier bekomen we een systeem met $N = 50$, $q/U = 0.2$ en $\Omega/U = 12$.

De dynamica van het beschouwde systeem is afgebeeld in figuur 4.8. Een belangrijk verschil dat wordt opgemerkt ten opzichte van het vorige systeem dat besproken werd is dat de truncated Wigner oscillaties nu inderdaad uitdempen naar een stationaire toestand. De exacte oplossing vertoont vergelijkbare dynamica met het vorige geval, enkel zijn er iets minder fluctuaties en is de initiële piek in spinparen groter. Wat hier wel opvalt is dat de exacte oplossing voor nagenoeg de hele tijdsevolutie boven de dynamica in truncated Wigner benadering ligt. In tegenstelling tot het eerste geval dat besproken werd in deze sectie (figuur 4.5) vertonen beide beschrijvingen een relaxatie richting thermalisatie maar met een gemiddelde van $\bar{n}_p = 0.29$ ligt de truncated Wigner dynamica verder van het ware thermisch evenwicht op $n_p = 1/3$ dan de exacte oplossing waar $\bar{n}_p = 0.31$. Dit is een interessante observatie aangezien in de truncated Wigner benadering net voor een kleinere van Ω/U al sneller een relaxatie richting thermisch evenwicht werd waargenomen. De verklaring voor dit gedrag verschuilt zich echter in de grotere bijdrage van het kwadratisch Zeemaneffect voor dit systeem, in het onderdeel over de dynamica voor een systeem met een groot kwadratisch Zeemaneffect zagen we namelijk dat het aantal spinparen voor een grote waarde van q/U drastisch werd onderschat in de truncated Wigner benadering.

Hoewel de truncated Wigner benadering erop lijkt te wijzen dat het kwadratische en lineaire (symmetriebrekende) Zeemaneffect voor deze waarden van de parameters allebei een competitieve bijdrage leveren, zien we dat er nog steeds Rabi oscillaties zonder enige demping optreden in de Gross-Pitaevskii dynamica. Dit wijst erop dat in de Gross-Pitaevskii vergelijkingen het kwadratisch Zeemaneffect toch nog een kleinere bijdrage levert dan het lineaire Zeemaneffect in dit regime.

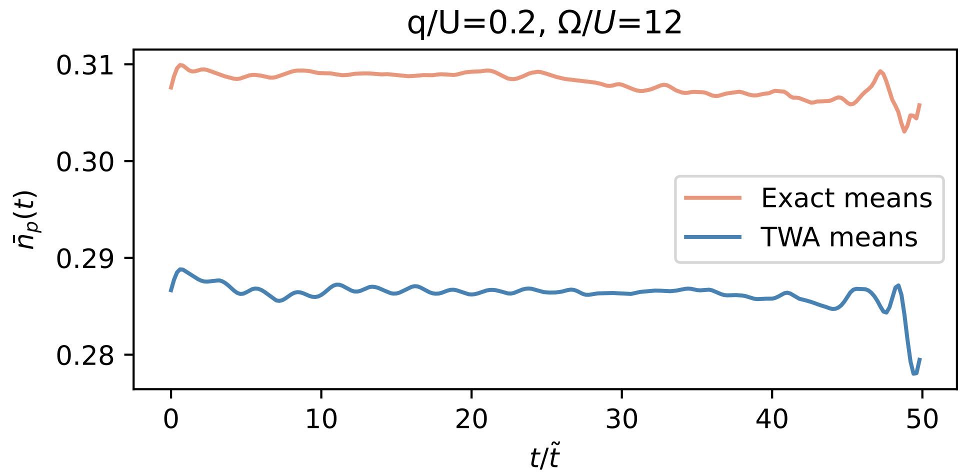
Grootheden

Als intermezzo bekijken we nog twee grootheden die de dynamica verder illustreren voor het systeem met $N = 50$, $q/U = 0.2$ en $\Omega/U = 12$.

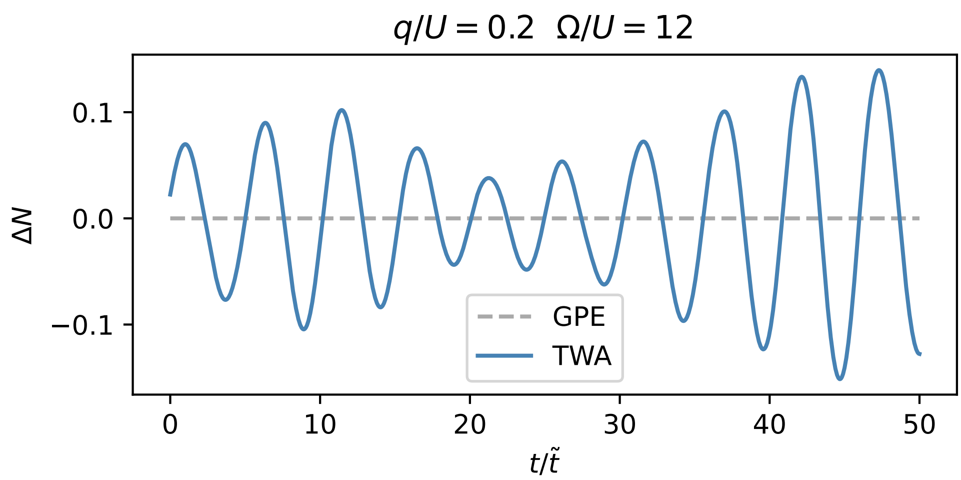
De eerste grootheid toont hoe het gemiddeld aantal spinparen evolueert doorheen de tijd. Hiertoe werd het gemiddelde berekend van het aantal spinparen tussen een vaste eindtijd en variërende begintijd. Uitgedrukt in een algemene formule komt dit overeen met,

$$\bar{n}_p(t) = \frac{1}{t_e - t} \int_t^{t_e} n_p dt, \tag{4.4}$$

[8]Voor $N = 400$ resulteert dit verband in $q/U = 0.07$, de waarde geeft ons dus een schatting van (de grootteorde van) de energieschaal. Het voorziet ons van een gefundeerde gok maar geeft logischerwijs geen exacte waarde die bepaalde dynamica garandeerd.



Figuur 4.9: Figuur die het verloop van het gemiddeld aantal spinparen weergeeft doorheen de tijd. De roze lijn duidt het resultaat voor de exacte oplossing aan en de blauwe lijn die voor truncated Wigner dynamica.



Figuur 4.10: Figuur die het verschil in deeltjes in de $|m = +1\rangle$ en $|m = -1\rangle$ toestand doorheen de tijd weergeeft voor truncated Wigner en Gross-Pitaevskii dynamica. De blauwe lijn en het verschil N_v in truncated Wigner en de grijze stippellijn stelt het verschil in Gross-Pitaevskii dynamica voor.

waarbij t_e de vastgelegde eindtijd van de dynamica voorstelt en t de variërende begintijd is vanaf wanneer het gemiddelde genomen wordt.

In figuur 4.9 zien we meteen in meer detail hoe de twee beschrijvingen hier consistent een verschillend aantal spinparen opleveren (een verschil van ongeveer 0.02). Daarnaast zien we voor vroege begintijden een hogere waarde, wat logisch is aangezien de dynamica door uitgemiddeld wordt over het volledige tijdsinterval waarover geëvalueerd wordt en het inderdaad te verwachten is dat de initiële piek in spinparen het gemiddelde omhoog zal trekken. Daarna stabiliseert het gemiddelde en zien we pas voor latere starttijden afwijkingen in het gemiddelde optreden, wat opnieuw te verklaren is door de tijd waarover wordt uitgemiddeld. Voor deze late starttijden wordt namelijk slechts over de laatste iteraties het gemiddelde genomen, wat door de aanwezige fluctuaties geen representatief beeld meer geeft van de gemiddelde waarde voor de dynamica. De gemiddeldes die in dit hoofdstuk gegeven worden zijn daarom steeds over voldoende waarden genomen maar sluiten de begindynamica uit.

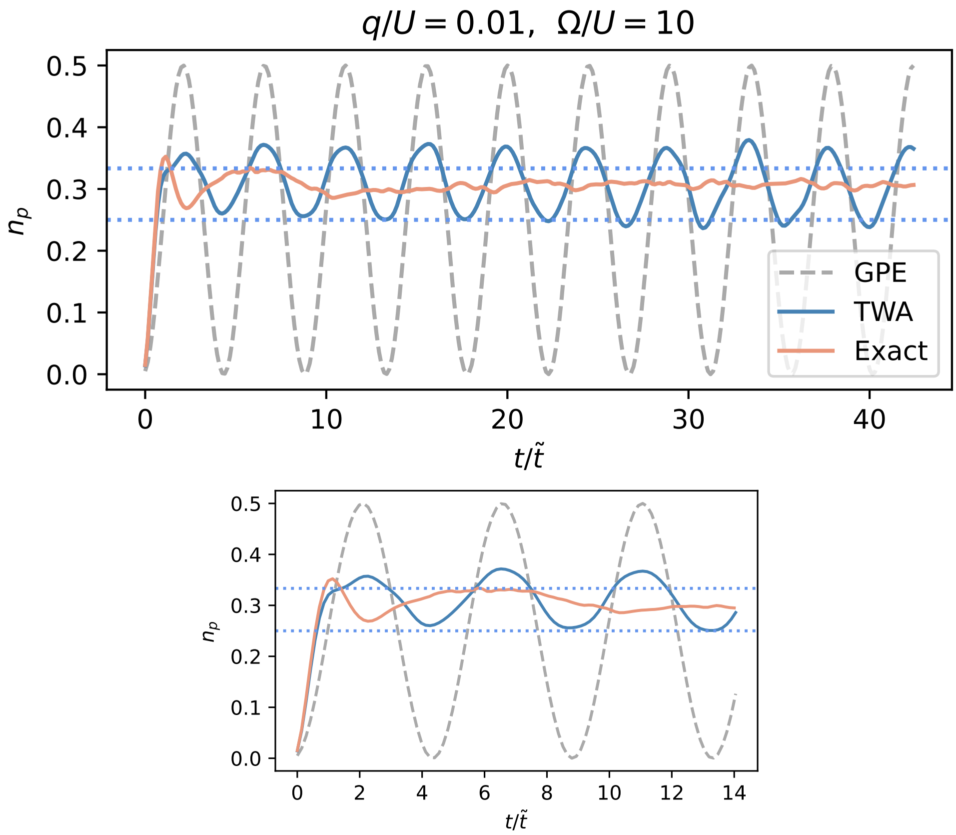
De volgende grootheid toont het verschil in deeltjes in de $|m = +1\rangle$ en $|m = -1\rangle$ toestand $\Delta N = N_+ - N_-$. Figuur 4.10 illustreert hoe de S_z symmetrie inderdaad gebroken is na het toevoegen van de symmetriebrekende term. Zoals ook te verwachten is vertoont dit verschil in de truncated Wigner dynamica oscillaties. Wat hier wel interessant is, is dat deze voor dit systeem een soort enveloppe lijken te vertonen, waar er voor andere systemen soms steeds dezelfde amplitude wordt waargenomen. Het gemiddelde van ΔN over de volledige dynamica is wel steeds nagenoeg gelijk aan nul[9]. Voor de Gross-Pitaevskii dynamica zien we dat $N_+ = N_-$ behouden blijft, wat logisch is wanneer men een blik werpt op de vergelijkingen (1.73 en 2.21).

Meer deeltjes

Hoewel de grootte van de Hilbertruimte het aantal deeltjes dat kan worden beschouwd sterk beperkt, zowel door de tijd die nodig is voor berekeningen als de grootte van de data voor opslag, is het wel mogelijk om voor 100 deeltjes de dynamica voor korte tijden te beschouwen.

Voor meer deeltjes ($N = 100$ in figuur 4.11) en een grote waarde voor Ω/U, zien we dat de relaxatie in de exacte oplossing nog stabieler wordt en het effect van revivals nagenoeg verdwijnt. De grotere waarde voor Ω/U zorgt ervoor dat de relaxatie die geobserveerd wordt voor zowel de truncated Wigner benadering als de exacte oplossing een gemiddelde heeft van $\bar{n}_p = 0.31$ en het systeem dus opnieuw richting ware thermalisatie brengt zonder deze volledig te bereiken. En hoewel hierdoor het echte prethermalisatieplateau verdwijnt zien we hiervan wel nog een duidelijk overblijfsel in de vorm van een korte vermindering in spinparen na de initiële piek. Daarnaast blijft de truncated Wigner dynamica oscillaties vertonen die te groot zijn, deze liggen gemiddeld wel rond de verwachte relaxatiewaarde maar doven niet uit zoals geobserveerd werd in figuur 4.7. Aan de persistente oscillaties die waargenomen worden in de truncated Wigner dynamica en de Rabi oscillaties die zich opnieuw voordoen in de Gross-Pitaevskii dynamica zien we dat, zoals te verwachten is voor deze waarden, de symmetriebrekende term te sterk overheerst om in de dynamica veel effect van q/U te ondervinden. Voor een meer competitieve waarde van q/U wordt verwacht dat de truncated Wigner oscillaties zullen uitdoven zoals in figuur 4.8.

[9] Afhankelijk van over welke tijd het gemiddelde genomen werd kan dit door de oscillaties logischerwijs licht variëren.



Figuur 4.11: Dynamica voor zowel de Gross-Pitaevskii vergelijkingen en de truncated Wigner benadering als de exacte oplossing voor een condensaat met N=100, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 10$. Het gemiddeld aantal spinparen na de initiële dynamica is voor zowel de truncated Wigner benadering als de exacte oplossing $\bar{n}_p = 0.31$. De volle roze lijn duidt hier de exacte oplossing aan, de volle blauwe lijn de dynamica in truncated Wigner benadering en de grijze stippellijn de Gross-Pitaevskii dynamica. De blauwe stippellijn geeft de verwachte prethermalisatiewaarde $n_p = 1/4$ aan en in het bovenste paneel is ook $n_p = 1/3$ voor ware thermalisatie toegevoegd.

4.2.3 Fourierfrequenties

Aangezien voor het systeem met behouden symmetrie de Bogoliubov voorspelling een goede benadering vormde voor vroege dynamica, bekijken we ook nu de symmetrie gebroken is of deze overeenkomst zich nog voordoet. De Bogoliubov benadering vertoonde vooral een goede overeenkomst in oscillatiefrequentie wanneer de Zeeman splitting hoog was (een grote waarde voor q/U), aangezien de bezetting van de $|\pm\rangle$ toestanden dan energetisch onderdrukt wordt en een groot deel van de deeltjes zich in de $|0\rangle$ mode zal bevinden. Aangezien de waarde voor q/U bewust laag gehouden wordt om binnen het regime te blijven waar prethermalisatie naar de verwachtingswaarde uit het veralgemeend Gibbs ensemble mogelijk is, verwachten we hier initieel niet meteen een goede overeenkomst totdat grotere waarden voor Ω/U beschouwd worden, zoals ook werd waargenomen voor de systemen die hierboven besproken werden. De symmetriebrekende term die werd toegevoegd zorgt namelijk ook voor een Zeeman effect, maar dan het lineaire in plaats van het kwadratische.

Waar we voornamelijk naar op zoek zijn is een verklaring voor de Gross-Pitaevskii oscillaties. We verwachten hier namelijk dat nu de spin mixing dynamica de kans heeft om op gang te komen de gelineariseerde dynamica van de Gross-Pitaevskii vergelijkingen ervoor zal zorgen dat de bijhorende frequenties overeenstemmen met die van de Bogoliubov benadering.
In figuur 4.12 zijn die pieken in de Fourierspectra van de Gross-Pitaevskii dynamica in vergelijking met de Bogoliubovfrequentie afgebeeld voor drie van de besproken systemen die oscillaties vertonen[10]. Hier zien we dat de Bogoliubovfrequentie inderdaad steeds in de buurt ligt van de frequenties voor de dynamica uit de Gross-Pitaevskii vergelijkingen. Enkel voor het derde systeem (figuur (c)) is er een groter verschil tussen de frequenties.

In tabel 4.1 en 4.2 zijn de frequenties voor de Bogoliubov benadering[11] (2.16) en de Fourierfrequenties gegeven voor verschillende systemen met respectievelijk $N = 400$ en $N = 50$. Hier is aan de frequenties uit de Bogoliubov benadering te zien dat, vooral bij het grotere systeem, het effect van het vergroten van Ω veel kleiner is dan wanneer we q laten toenemen. Daarnaast zien we in de eerste tabel ook dat het veranderen van Ω geen of nauwelijks effect lijkt te hebben op de frequentie die men haalt uit de Gross-Pitaevskii dynamica[12], opnieuw zou dit te verklaren kunnen zijn doordat, hoewel dit voor grotere systemen een minder groot probleem leek te zijn, de waarde voor Ω/U niet groot genoeg is in vergelijking met q/U om het effect van een toenemende bijdrage van de symmetriebrekende term te merken in de dynamica voor waarden van Ω/U met deze grootteorde. Het is echter ook mogelijk dat dit ligt aan het feit dat de datapunten die gegeven worden in de Fourieranalyse steeds op een afstand 0.20 van elkaar afliggen en de juiste frequentie hierdoor niet exact kon worden aangeduid.

Voor een kleiner systeem van $N = 50$ deeltjes zien we dan weer dat het vergroten van Ω hier wel een grotere impact heeft, maar nog steeds moet de voorfactor van de symmetriebrekende term meerdere grootteordes groter zijn dan q om een gelijkaardige impact te hebben op de dynamica van het systeem. Het kleinere aantal deeltjes, mogelijks in combinatie met een grotere waarde voor Ω, lijkt er in dit geval ook voor te zorgen dat de oscillatiefrequenties uit de Gross-Pitaevskii vergelijkingen net sterker afwijken van de Bogoliubov benadering.

Aangezien de meeste systemen in de tabellen oscillaties vertonen met een verschillende frequen-

[10](a): $N = 400$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 0.6$, (b): $N = 400$, $q/U = 0$ en $\Omega/U = 1$ en (c): $N = 50$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 7$.

[11]Er wordt steeds gewerkt met de grootste positieve Bogoliubov frequentie aangezien deze het vaakst de beste benadering opleverde.

[12]Het enige verschil dat kon worden opgemerkt in de Fourieranalyse voor variërende Ω was de sterkte van de pieken.

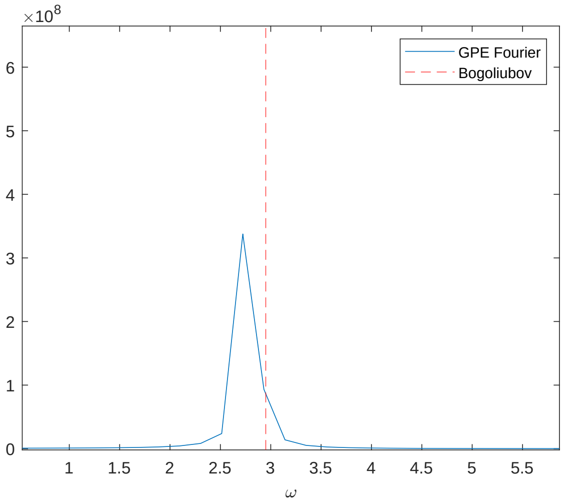
$N = 400$	ω_{Bog}	ω_{GPE}
$q = 0.01,\ \Omega = 0.6$	2.95	2.72
$q = 0.01,\ \Omega = 1$	3.15	2.72
$q = 0.05,\ \Omega = 0.3$	6.34	6.28
$q = 0.05,\ \Omega = 0.6$	6.38	6.28
$q = 0.05,\ \Omega = 0.06$	6.33	6.28
$q = 0.05,\ \Omega = 1$	6.48	6.28
$q = 0.20,\ \Omega = 0.3$	12.66	12.56
$q = 0.20,\ \Omega = 0.6$	12.68	12.56
$q = 0.20,\ \Omega = 1$	12.73	12.56
$q = 0.50,\ \Omega = 0.3$	20.01	20.11
$q = 0.50,\ \Omega = 1$	20.06	20.11

Tabel 4.1: Bogoliubovfrequentie en frequentie uit Fourieranalyse van de Gross-Pitaevskii dynamica voor systemen met 400 deeltjes.

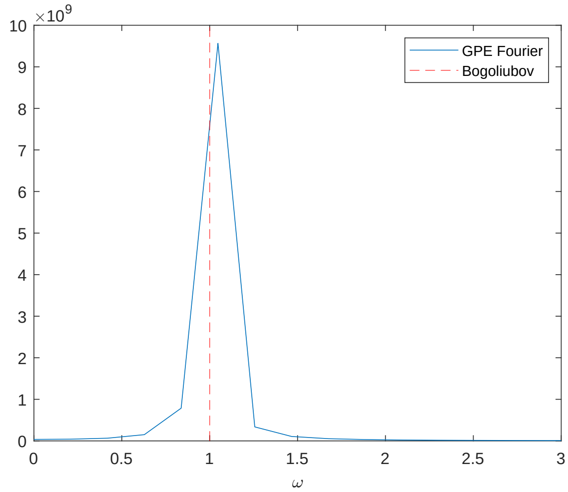
$N = 50$	ω_{Bog}	ω_{GPE}
$q = 0.01,\ \Omega = 0.3$	1.08	1.01
$q = 0.01,\ \Omega = 0.6$	1.28	0.63
$q = 0.01,\ \Omega = 5$	5.53	5.03
$q = 0.01,\ \Omega = 7$	7.52	6.91
$q = 0.20,\ \Omega = 5$	7.72	3.77
$q = 0.20,\ \Omega = 10$	12.49	9.42

Tabel 4.2: Bogoliubovfrequentie en frequentie uit Fourieranalyse van de Gross-Pitaevskii dynamica voor systemen met 50 deeltjes.

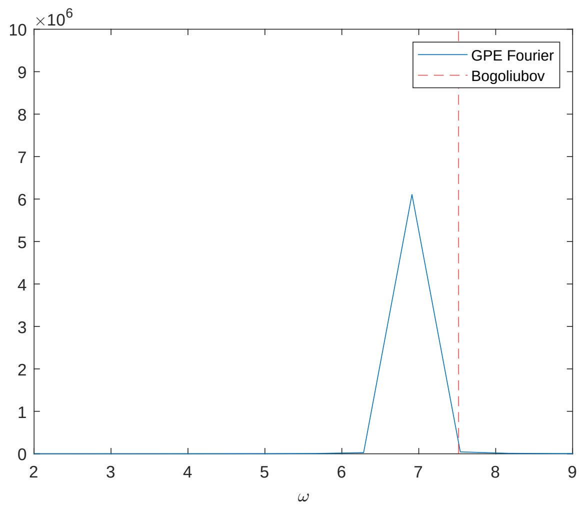
tie dan die voorspelt door de Gross-Pitaevskii of Bogoliubov vergelijkingen, zegt dit weinig over andere dynamica dan die afkomstig van de Gross-Pitaevskii vergelijkingen maar dit geeft wel een idee van de impact van de waarden van de systeemparameters op de dynamica. Het geeft een extra indicatie dat er een één tot meerdere grootteordes grotere waarde voor Ω/U nodig is om de symmetriebreking een competitieve bijdrage te laten leveren in vergelijking met het kwadratisch Zeeman effect.



(a) Fourierfrequentie en bijhorende Bogoliubovfrequentie voor $N = 400$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 0.6$. De waarde voor de frequentie uit Fourieranalyse is $\omega_{GPE} = 2.72$ en de afgebeelde Bogoliubovfrequentie is $\omega_{Bog} = 2.95$.



(b) Fourierfrequentie en bijhorende Bogoliubovfrequentie voor $N = 400$, $q/U = 0$ en $\Omega/U = 1$. De waarde voor de frequentie uit Fourieranalyse is $\omega_{GPE} = 1.04$ en de afgebeelde Bogoliubovfrequentie is $\omega_{Bog} = 1$.



(c) Fourierfrequentie en bijhorende Bogoliubovfrequentie voor $N = 50$, $q/U = 0.01$ en $\Omega/U = 7$. De waarde voor de frequentie uit Fourieranalyse is $\omega_{GPE} = 6.91$ en de afgebeelde Bogoliubovfrequentie is $\omega_{Bog} = 7.52$.

Figuur 4.12: Figuren met de frequentie uit Fourieranalyse voor Gross-Pitaevskii dynamica (blauwe lijnen) en de verwachte frequentie uit de Bogoliubov benadering (oranje stippellijn.

4.3 Discussie

Het vergelijken van de dynamica in truncated Wigner benadering en voor de exacte oplossing leverde enkele interessante observaties op. Zo blijkt dat over het algemeen de truncated Wigner dynamica te veel oscillaties vertoont die bij de exacte oplossing niet aanwezig zijn, maar die in het geval dat Ω/U voldoende groot is wel oscilleren rond een gemiddelde waarde die dichtbij de (gemiddelde) relaxatiewaarde van de exacte oplossing ligt. Wanneer Ω/U te klein is om de symmetriebreking voldoende impact te laten hebben op de exacte oplossing wordt in de truncated Wigner benadering echter wel al een gemiddelde waarde in de buurt van thermalisatie waargenomen voor de dynamica (figuur 4.5). Verder zagen we dat de verhouding tussen q/U en Ω/U een belangrijke factor speelde in de vraag of de bijdrage van het lineaire Zeemaneffect het systeem tot thermalisatie zou kunnen brengen en hierin logischerwijs ook sterk afhankelijk was van het beschouwde aantal deeltjes N in een systeem. Uit het systeem dat besproken werd met zowel een grote bijdrage van het kwadratisch Zeemaneffect als het lineaire werd duidelijk dat de waarden voor q/U en Ω/U en hun onderlinge verhouding niet alleen een invloed heeft op de dynamica zelf maar als gevolg hiervan ook effect kan hebben op de overeenkomst van de exacte oplossing met de truncated Wigner benadering. We zagen hier (figuur 4.1) dat een groot kwadratisch Zeemaneffect een drastische invloed heeft op de truncated Wigner dynamica, die in zo'n gevallen geen goede benadering meer is van de exacte oplossing. Dit werd in mindere mate ook geobserveerd bij het systeem afgebeeld in figuur 4.8.

Hoewel dynamica de truncated Wigner dynamica voor $N = 400$ deeltjes zelfs voor een kleine waarde van Ω/U (0.6) zowel een initieel prethermalisatieplateau vertoonde als een tweede relaxatie naar thermisch evenwicht op een veel langere tijdsschaal (figuur 4.2), was voor het kleinere systeem waarbij $N = 50$ steeds een grotere waarde voor Ω/U nodig om ook de exacte oplossing tot thermisch evenwicht te brengen. Deze regimes vertoonden na de eerste piek nog een korte vermindering in spinparen maar waren niet meer in staat om *prethermalisatie* bij $n_p = 1/4$ te bereiken.

Verder werd waargenomen dat het effect van *revivals*, die opduiken als gevolg van de beperking op de grootte van de systemen beschouwd kunnen worden, niet alleen afhankelijk is van de grootte van het systeem N, maar ook beïnvloed wordt door de parameters in de Hamiltoniaan. Zo zagen we dat niet alleen systemen met groter aantal deeltjes N (figuur 4.11) maar ook systemen met een grote waarde voor Ω/U (figuur 4.7) een sterk verminderde invloed ondervonden van dit kwantumeffect tegenover systemen een kleine waarde voor Ω/U (figuur 4.5) .

Een laatste belangrijke opmerking is dat in de regimes waar de verwachte relaxatie, die het gevolg is van de breking van de S_z symmetrie, zich voordoet dit nooit precies een fractie 1/3 oplevert voor het aantal deeltjes dat zich in paren bevindt. De relaxatie is duidelijk losgebroken van de relexatiewaarde uit het veralgemeend Gibbs ensemble waarbij $\bar{n}_p = 1/4$ was, maar ligt over het algemeen dichter bij 30%[13] dan bij de verwachte $\bar{n}_p = 1/3 \approx 33\%$. Dat het systeem relaxeert in de *richting* van ware thermalisatie maar dit nooit volledig lijkt te bereiken werd ook geobserveerd in [16], waar onder andere ook de breking van symmetrie voor dit systeem werd bestudeerd, maar dan aan de hand van een een theoretische aanpak op basis van Gausissche kwantumtrajecten.

Hoewel de gefundeerde gok op basis van de tijdsschaal van thermalisatie voor het integreerbare systeem ons een bruikbare waarde opleverde voor een regime waarin de bijdrage van het lineaire Zeemaneffect competitief genoeg was om dynamica op te leveren die relaxeerde richting de gewenste thermalisatiewaarde, werd duidelijk dat de energieschaal voor Ω/U niet voldoet aan een

[13] Dit effect wordt nog duidelijker wanneer het totaal aantal deeltjes in paren beschouwd wordt. Hierbij verwacht men een relaxatiewaarde $n_p \approx 0.66$ voor thermisch evenwicht, maar worden consistent waarden rond $n_p = 0.60$ geobserveerd.

gelijkaardig verband als het kwadratisch Zeemaneffect. Ω was duidelijk afhankelijk van N, maar om een accurate energie- of tijdsschaal te bekomen voor thermalisatie is meer analytisch inzicht nodig in dit verband.

Conclusie

In deze thesis werd de dynamica van spinorcondensaten uit evenwicht onderzocht. Meer specifiek lag de focus op thermalisatie van het systeem. Voor integreerbare systemen, reeds eerder bestudeerd door B. Evrard er al. [2] (experimenteel) en L. Fernandes et al. [3] (theoretisch), belet het behoud van de S_z magnetisatie dat het systeem relaxeert naar thermisch evenwicht. In plaats daarvan vindt een relaxatie naar een veralgemeend evenwicht plaats dat kan worden bepaald aan de hand van een veralgemeend Gibbs ensemble dat de symmetriën van het systeem in rekening neemt. De resultaten voor de dynamica van het systeem met behouden symmetrie werden gereproduceerd in hoofdstuk 3.

Wanneer deze symmetrie en bijgevolg ook de integrabiliteit van het systeem gebroken worden verwacht men vanuit de eigentoestand thermalisatie hypothese (ETH) dat het systeem wel in staat zou moeten zijn om thermalisatie te bereiken. Het onderzoeken of dit inderdaad het geval is was het centrale doel van deze thesis. Hieruit bleek dat de dynamica sterk afhankelijk was van de verhouding tussen de bijdrage van het kwadratische Zeemaneffect en de symmetriebrekende term (lineair Zeemaneffect). De waarde voor Ω die de sterkte van de symmetriebreking aangeeft, moest in verhouding één tot meerdere grootteordes groter zijn dan parameter q voor de kwadratische Zeeman term in de Hamiltoniaan. Verschillende combinaties van waarden voor deze parameters leverden sterk uiteenlopende dynamica op. Voor het systeem in lineair regime (een groot kwadratisch Zeemaneffect) werd zo'n drastisch verschil in de dynamica voor de exacte oplossing en in truncated Wigner benadering opgemerkt dat deze laatste geen goede benadering meer vormde. Voor een voldoende sterke invloed van de symmetriebreking deed zich in het sterk interagerend regime echter wel steeds dynamica voor die gemiddeld tot een relaxatie richting de verwachte thermalisatiewaarde $n_p = 1/3$ leidde. Er werd steeds met gemiddeldes gewerkt om de relaxatie te beschrijven aangezien de truncated Wigner dynamica over het algemeen te veel oscillaties vertoonde. Daarnaast waren we door de uitbreiding van de Hilbertruimte als gevolg van de symmetriebreking beperkt tot een kleiner systeem van $N = 50$, of $N = 100$ voor korte tijden, waardoor revivals opdoken in de dynamica voor systemen met slechts 50 deeltjes. Het optreden van dit kwantumeffect vormde een extra indicatie dat gemiddeldes een betere grootheid waren om de observaties op te baseren in deze gevallen. Voor deze systemen werd waargenomen dat het optreden van revivals niet enkel afhankelijk is van de grootte van het systeem, maar ook beïnvloed wordt door de parameters in de Hamiltoniaan. Zo verminderden de revivals sterk voor een waarde van Ω waarvoor de symmetriebrekende dynamica domineerde. Dit was te verklaren door het feit dat de breking van de integrabiliteit de regelmatigheid van het spectrum verstoort, wat zorgt voor meer mogelijke frequenties en een langere revivaltijd.

De dynamica die oorspronkelijk verwacht werd in overeenkomst met het artikel van Fernandes et al. [3], waarbij de spin mixing dynamica het initiële prethermalisatieplateau op $n_p = 1/4$ verliest maar nog wel een korte vermindering in het aantal spinparen vertoont alvorens te relaxeren richting thermisch evenwicht, werd uiteindelijk geobserveerd voor $q/U = 0.2$ en $\Omega/U = 12$. Dit was ook het enige regime waar de oscillaties in de truncated Wigner benadering uitdoofden en de dynamica gelijkaardig was aan die voor de exacte oplossing. Er werd wel opgemerkt dat de grotere waarde voor q/U zelfs in dit geval al voor een dynamica met minder spinparen zorgde in de truncated Wigner benadering.

Een boeiende observatie die werd gemaakt is dat de ware thermalisatie met een gelijke populatie in de drie spinmodes nooit precies wordt bereikt. Thermisch evenwicht zou overeenkomen met een fractie van 1/3 of ongeveer 33% van de deeltjes dat zich in spinparen bevindt. In plaats daarvan zagen we dat de relaxatiewaarde gemiddeld (bij zowel oscillerende als niet oscillerende dynamica) rond $\bar{n}_p = 30\%$ bleef schommelen met enkele gevallen waarin het systeem in staat was een relaxatiewaarde van 31% of 32% te bereiken. Dit gedrag werd ook geobserveerd in het artikel van Fernandes et al. [3] waar de dynamica voor symmetriebreking onderzocht werd met behulp van een theoretische aanpak gebaseerd op Gaussische kwantumtrajecten.

Vooruitblik

Zoals gewoonlijk heeft dit onderzoek ook enkele verdere vragen naar boven gebracht die mogelijks een interessant onderwerp kunnen vormen voor verder onderzoek.

Als eerste zou het interessant kunnen zijn om meer analytisch inzicht te vergaren in de energie- en tijdsschaal van Ω voor thermalisatie. Hoewel Ω namelijk duidelijk afhankelijk is van N, is nog meer kennis nodig over het precieze verband om te achterhalen of er een vergelijkbare uitdrukking voor de energie- en tijdsschaal voor thermalisatie te bekomen is als voor het kwadratisch Zeemaneffect.

Een tweede boeiende piste voor verder onderzoek is het feit dat thermisch evenwicht nog niet volledig bereikt wordt. Dit zou kunnen liggen aan het feit dat er nog niet voldoende modes zijn in het systeem. Om dit op te lossen zou men kunnen werken met gekoppelde condensaten om te bekijken of het systeem dan wel in staat is om volledige thermalisatie te bereiken. Voor dit soort systemen krijgt men echter wel te maken met het ruimtelijke aspect van de dynamica en zal het feit dat hierdoor de exacte oplossing computationeel te zwaar wordt een bijkomende uitdaging vormen.

Bibliografie

[1] M. Rigol, V. Dunjko, V. Yurovsky en M. Olshanii, „Relaxation in a Completely Integrable Many-Body Quantum System: An *Ab Initio* Study of the Dynamics of the Highly Excited States of 1D Lattice Hard-Core Bosons," *Physical Review Letters*, jrg. 98, nr. 5, p. 050 405, 1 feb 2007, ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.050405.

[2] B. Evrard, A. Qu, J. Dalibard en F. Gerbier, „From Many-Body Oscillations to Thermalization in an Isolated Spinor Gas," *Physical Review Letters*, jrg. 126, nr. 6, p. 063 401, 12 feb 2021, ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.063401.

[3] L. Fernandes, M. Wouters en J. Tempere, „Gaussian trajectory description of fragmentation in an isolated spinor condensate," *Physical Review A*, jrg. 105, nr. 1, p. 013 305, 7 jan 2022, ISSN: 2469-9926, 2469-9934. DOI: 10.1103/PhysRevA.105.013305.

[4] Bose, „Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese," *Zeitschrift für Physik*, jrg. 26, nr. 1, p. 178–181, dec 1924, ISSN: 1434-6001, 1434-601X. DOI: 10.1007/BF01327326.

[5] F. London, „On the Bose-Einstein Condensation," *Physical Review*, jrg. 54, nr. 11, p. 947–954, 1 dec 1938, ISSN: 0031-899X. DOI: 10.1103/PhysRev.54.947.

[6] L. D. Landau en E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*. Oxford: Pergamon Press, 1951.

[7] O. Penrose, „CXXXVI. On the quantum mechanics of helium II," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, jrg. 42, nr. 335, p. 1373–1377, dec 1951, ISSN: 1941-5982, 1941-5990. DOI: 10.1080/14786445108560954.

[8] O. Penrose en L. Onsager, „Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium," *Physical Review*, jrg. 104, nr. 3, p. 576–584, 1 nov 1956, ISSN: 0031-899X. DOI: 10.1103/PhysRev.104.576.

[9] L. Onsager, „Statistical hydrodynamics," *Il Nuovo Cimento*, jrg. 6, nr. S2, p. 279–287, mrt 1949, ISSN: 0029-6341, 1827-6121. DOI: 10.1007/BF02780991.

[10] R. Feynman, „Chapter II Application of Quantum Mechanics to Liquid Helium," in *Progress in Low Temperature Physics*, deel 1, Elsevier, 1955, p. 17–53, ISBN: 978-0-444-53307-4. DOI: 10.1016/S0079-6417(08)60077-3.

[11] H. E. Hall en W. F. Vinen, „The rotation of liquid helium II II. The theory of mutual friction in uniformly rotating helium II," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, jrg. 238, nr. 1213, p. 215–234, 18 dec 1956, ISSN: 0080-4630, 2053-9169. DOI: 10.1098/rspa.1956.0215.

[12] L. Pitaevskii en S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation and Superfluidity*, 1ste ed. Oxford University PressOxford, 1 jan 2016, ISBN: 978-0-19-875888-4. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780198758884.001.0001.

[13] C. J. Pethick en H. Smith, *Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2de ed. Cambridge University Press, 11 sep 2008, ISBN: 978-0-521-84651-6. DOI: 10.1017/CBO9780511802850.

[14] E. A. Cornell en C. E. Wieman, „Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments," *Reviews of Modern Physics*, jrg. 74, nr. 3, p. 875–893, 19 aug 2002, ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: 10.1103/RevModPhys.74.875.

[15] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman en E. A. Cornell, „Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor," *Science*, jrg. 269, nr. 5221, p. 198–201, 14 jul 1995, ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.269.5221.198.

[16] L. Fernandes, „Fluctuations in Multicomponent Quantum Fluids," PhD thesis, Antwerpen, 2024.

[17] J. Tempere, „Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity."

[18] Y. Castin, „Bose-Einstein Condensates in Atomic Gases: Simple Theoretical Results," in deel 72, 2001, p. 1–136. DOI: 10.1007/3-540-45338-5_1. arXiv: cond-mat/0105058.

[19] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne en E. Tiesinga, „Feshbach Resonances in Ultracold Gases," versie 2, 2008. DOI: 10.48550/ARXIV.0812.1496.

[20] I. Bloch, J. Dalibard en S. Nascimbène, „Quantum simulations with ultracold quantum gases," *Nature Physics*, jrg. 8, nr. 4, p. 267–276, apr 2012, ISSN: 1745-2473, 1745-2481. DOI: 10.1038/nphys2259.

[21] R. P. Feynman, „Simulating physics with computers," *International Journal of Theoretical Physics*, jrg. 21, nr. 6-7, p. 467–488, jun 1982, ISSN: 0020-7748, 1572-9575. DOI: 10.1007/BF02650179.

[22] J. Tempere, „Course notes for Solid State Physics II."

[23] D. M. Stamper-Kurn en M. Ueda, „Spinor Bose gases: Symmetries, magnetism, and quantum dynamics," *Reviews of Modern Physics*, jrg. 85, nr. 3, p. 1191–1244, 26 jul 2013, ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.1191.

[24] G. E. Marti en D. M. Stamper-Kurn. „Spinor Bose-Einstein Gases." arXiv: 1511.01575 [cond-mat, physics:quant-ph]. (4 nov 2015), preprint.

[25] Y. Kawaguchi en M. Ueda, „Spinor Bose–Einstein condensates," *Physics Reports*, jrg. 520, nr. 5, p. 253–381, nov 2012, ISSN: 03701573. DOI: 10.1016/j.physrep.2012.07.005.

[26] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva en M. Vengalattore, „*Colloquium* : Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems," *Reviews of Modern Physics*, jrg. 83, nr. 3, p. 863–883, 15 aug 2011, ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.863.

[27] L. D'Alessio, Y. Kafri, A. Polkovnikov en M. Rigol, „From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics," *Advances in Physics*, jrg. 65, nr. 3, p. 239–362, 3 mei 2016, ISSN: 0001-8732, 1460-6976. DOI: 10.1080/00018732.2016.1198134.

[28] L. C. Venuti en L. Liu, „Ergodicity, Eigenstate Thermalization, and the Foundations of Statistical Mechanics in Quantum and Classical Systems," versie 1, 2019. DOI: 10.48550/ARXIV.1904.02336.

[29] T. Kinoshita, T. Wenger en D. S. Weiss, „A quantum Newton's cradle," *Nature*, jrg. 440, nr. 7086, p. 900–903, apr 2006, ISSN: 0028-0836, 1476-4687. DOI: 10.1038/nature04693.

[30] J. M. Deutsch, „Quantum statistical mechanics in a closed system," *Physical Review A*, jrg. 43, nr. 4, p. 2046–2049, 1 feb 1991, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.43.2046.

[31] J. M. Deutsch, „Eigenstate Thermalization Hypothesis," *Reports on Progress in Physics*, jrg. 81, nr. 8, p. 082 001, 1 aug 2018, ISSN: 0034-4885, 1361-6633. DOI: 10.1088/1361-6633/aac9f1.

[32] M. Srednicki, „Chaos and quantum thermalization," *Physical Review E*, jrg. 50, nr. 2, p. 888–901, 1 aug 1994, ISSN: 1063-651X, 1095-3787. DOI: 10.1103/PhysRevE.50.888.

[33] N. Bogolubov, „ON THE THEORY OF SUPERFLUIDITY," in *Helium 4*, Elsevier, 1971, p. 247–267, ISBN: 978-0-08-015816-7. DOI: 10.1016/B978-0-08-015816-7.50020-1.

[34] E. P. Gross, „Structure of a quantized vortex in boson systems," *Il Nuovo Cimento*, jrg. 20, nr. 3, p. 454–477, mei 1961, ISSN: 0029-6341, 1827-6121. DOI: 10.1007/BF02731494.

[35] L. Pitaevskii, „Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas," *Sov. Phys. JETP*, jrg. 13, nr. 2, p. 451–454, 1961.

[36] A. Sinatra, C. Lobo en Y. Castin, „The Truncated Wigner Method for Bose-condensed Gases: Limits of Validity and Applications," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, jrg. 35, nr. 17, p. 3599–3631, 14 sep 2002, ISSN: 0953-4075. DOI: 10.1088/0953-4075/35/17/301.

[37] C. W. Gardiner en P. Zoller, *Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* (Springer Series in Synergetics), 2nd enlarged ed. Berlin ; New York: Springer, 2000, 438 p., ISBN: 978-3-540-66571-7.

[38] I. Carusotto en C. Ciuti, „Quantum fluids of light," *Reviews of Modern Physics*, jrg. 85, nr. 1, p. 299–366, 21 feb 2013, ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.299.

[39] J. Jie, Q. Guan, S. Zhong, A. Schwettmann en D. Blume, „Mean-field spin-oscillation dynamics beyond the single-mode approximation for a harmonically trapped spin-1 Bose-Einstein condensate," *Physical Review A*, jrg. 102, nr. 2, p. 023 324, 25 aug 2020, ISSN: 2469-9926, 2469-9934. DOI: 10.1103/PhysRevA.102.023324.

[40] N. N. Klausen, J. L. Bohn en C. H. Greene, „Nature of spinor Bose-Einstein condensates in rubidium," *Physical Review A*, jrg. 64, nr. 5, p. 053 602, 2 okt 2001, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.64.053602.

[41] S. Yi, Ö. E. Müstecaplıoğlu, C. P. Sun en L. You, „Single-mode approximation in a spinor-1 atomic condensate," *Physical Review A*, jrg. 66, nr. 1, p. 011 601, 2 jul 2002, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.66.011601.

[42] A. Black, E. Gomez, L. Turner, S. Jung en P. Lett, „Spinor Dynamics in an Antiferromagnetic Spin-1 Condensate," *Physical Review Letters*, jrg. 99, nr. 7, p. 070 403, 16 aug 2007, ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.070403.

[43] H. Pu, C. K. Law, S. Raghavan, J. H. Eberly en N. P. Bigelow, „Spin-mixing dynamics of a spinor Bose-Einstein condensate," *Physical Review A*, jrg. 60, nr. 2, p. 1463–1470, 1 aug 1999, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.60.1463.

[44] B. Evrard, A. Qu, J. Dalibard en F. Gerbier, „Coherent seeding of the dynamics of a spinor Bose-Einstein condensate: From quantum to classical behavior," *Physical Review A*, jrg. 103, nr. 3, p. L031302, 3 mrt 2021, ISSN: 2469-9926, 2469-9934. DOI: 10.1103/PhysRevA.103.L031302. arXiv: 2101.06716 [cond-mat].

[45] A. Lamacraft, „Spin-1 microcondensate in a magnetic field," *Physical Review A*, jrg. 83, nr. 3, p. 033 605, 9 mrt 2011, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.83.033605.

[46] B. Evrard, „Coherent Dynamics, Relaxation and Fragmentation of a Spinor Bose-Einstein Condensate," {Universit{\'e} Paris sciences et lettres}, sep 2020.

[47] T.-L. Ho en S. K. Yip, „Fragmented and Single Condensate Ground States of Spin-1 Bose Gas," *Physical Review Letters*, jrg. 84, nr. 18, p. 4031–4034, 1 mei 2000, ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.4031.

[48] E. J. Mueller, T.-L. Ho, M. Ueda en G. Baym, „Fragmentation of Bose-Einstein condensates," *Physical Review A*, jrg. 74, nr. 3, p. 033 612, 20 sep 2006, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.74.033612.

[49] P. Nozières en D. Saint James, „Particle vs. Pair Condensation in Attractive Bose Liquids,” *Journal de Physique*, jrg. 43, nr. 7, p. 1133–1148, 1982, ISSN: 0302-0738. DOI: 10.1051/jphys:019820043070113300.

[50] G. I. Mias, N. R. Cooper en S. M. Girvin, „Quantum noise, scaling, and domain formation in a spinor Bose-Einstein condensate,” *Physical Review A*, jrg. 77, nr. 2, p. 023 616, 14 feb 2008, ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: 10.1103/PhysRevA.77.023616.

[51] J. Tempere, „Kwantummechanica.”

[52] R. Robinett, „Quantum wave packet revivals,” *Physics Reports*, jrg. 392, nr. 1-2, p. 1–119, mrt 2004, ISSN: 03701573. DOI: 10.1016/j.physrep.2003.11.002.

[53] J. H. Eberly, N. B. Narozhny en J. J. Sanchez-Mondragon, „Periodic Spontaneous Collapse and Revival in a Simple Quantum Model,” *Physical Review Letters*, jrg. 44, nr. 20, p. 1323–1326, 19 mei 1980, ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.44.1323.

[54] M. Nauenberg, C. R. Stroud en J. A. Yeazell, „The Classical Limit of an Atom,” *Scientific American*, jrg. 270, p. 44–49, 1994.

[55] R. Bluhm, V. A. Kostelecký en J. A. Porter, „The evolution and revival structure of localized quantum wave packets,” *American Journal of Physics*, jrg. 64, nr. 7, p. 944–953, 1 jul 1996, ISSN: 0002-9505, 1943-2909. DOI: 10.1119/1.18304.

[56] C. K. Law, H. Pu en N. P. Bigelow, „Quantum Spins Mixing in Spinor Bose-Einstein Condensates,” *Physical Review Letters*, jrg. 81, nr. 24, p. 5257–5261, 14 dec 1998, ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.5257.