



Universiteit Antwerpen  
Faculteit Wetenschappen  
Departement Fysica  
Academiejaar 2010-2011

# Topologische excitaties in gemengde Bose-Einstein condensaten

Enya Vermeyen

Promotor: Prof. dr. Jacques Tempere

Proefschrift ter verkrijging van de graad van  
Master in de Fysica



# Inhoudsopgave

Abstract	v
Dankwoord	vii
Inleiding	ix
<b>I Achtergrond: Bose-Einstein Condensatie</b>	<b>1</b>
<b>1 Bose-Einstein condensatie met één component</b>	<b>3</b>
1.1 Bose-Einstein condensatie . . . . .	3
1.2 De Gross-Pitaevskii vergelijking . . . . .	4
1.3 Dynamica van het condensaat . . . . .	6
1.4 Gross-Pitaevskii energiefunctieaal in een roterend assenstelsel . . . . .	9
<b>2 Bose-Einstein condensatie met 2 componenten</b>	<b>11</b>
2.1 De Gross-Pitaevskii energie functieaal . . . . .	11
2.2 Continuïteitsvergelijking en superfluïde snelheid . . . . .	12
2.3 Verschillende beschrijvingen . . . . .	12
2.4 Skyrmionen . . . . .	16
<b>II Eén topologische excitatie</b>	<b>21</b>
<b>3 Variationele behandeling van één vortex</b>	<b>23</b>
3.1 De energiefunctieaal en de chemische potentiaal . . . . .	23
3.2 Probeer-golffunctie . . . . .	25
3.3 Omgaan met oneindigheden . . . . .	26
3.4 Minimalisatie van de energie . . . . .	28
3.5 Overgang van constante chemische potentiaal naar constant aantal deeltjes . . . . .	30
<b>4 Variationele behandeling van één skyrmion</b>	<b>37</b>
4.1 Dimensieloze Gross-Pitaevskii energiefunctieaal . . . . .	37
4.2 Het skyrmion: een gevulde vortex . . . . .	39
4.3 Uitwerken van de energie . . . . .	42
4.4 Grootte van het skyrmion . . . . .	44
4.5 Energie van het skyrmion . . . . .	45
<b>5 Vergelijking vortex-skyrmion</b>	<b>47</b>
5.1 Constante chemische potentiaal . . . . .	47
5.2 Constant aantal deeltjes . . . . .	53

<b>6</b>	<b>Creëren van een skyrmion</b>	<b>59</b>
6.1	Beschrijving . . . . .	59
6.2	Energie bij overgang vanaf $S_z = -1$ . . . . .	60
<b>III</b>	<b>Twee topologische excitaties</b>	<b>69</b>
<b>7</b>	<b>Twee vortices</b>	<b>71</b>
7.1	Beschrijving . . . . .	71
7.2	Energieberekening . . . . .	74
7.3	Totale energie . . . . .	77
<b>8</b>	<b>Twee skyrmionen</b>	<b>81</b>
8.1	Beschrijving . . . . .	81
8.2	Energieberekening . . . . .	83
<b>IV</b>	<b>Meerdere topologische excitaties</b>	<b>95</b>
<b>9</b>	<b>Overgang van een rij vortices naar een fasesliplijn</b>	<b>97</b>
9.1	Injectie van condensaat . . . . .	98
9.2	Fasesliplijn . . . . .	98
9.3	Rij vortices . . . . .	101
<b>10</b>	<b>Overgang van een rij skyrmionen naar een fasesliplijn</b>	<b>105</b>
10.1	Inleiding . . . . .	105
10.2	Skyrmion-fasesliplijn . . . . .	105
10.3	Rij skyrmionen . . . . .	108
10.4	Vergelijking tussen een rij skyrmionen en een skyrmion fasesliplijn . . . . .	116
<b>V</b>	<b>Conclusie</b>	<b>119</b>
<b>11</b>	<b>Conclusie</b>	<b>121</b>
<b>A</b>	<b>Gross-Pitaevskii energiefunctionaal in een roterend assenstelsel</b>	<b>125</b>
A.1	Kinetische energie . . . . .	126
A.2	Rotatie energie . . . . .	126
A.3	Totale energie . . . . .	127
<b>B</b>	<b>Gross-Pitaevskii energiefunctionaal in pseudospin notatie</b>	<b>129</b>
B.1	Kinetische energie . . . . .	130
B.2	Potentiële energie . . . . .	130
B.3	Interactie energie . . . . .	131
B.4	Rotatie energie . . . . .	131
B.5	Koppelingsenergie . . . . .	132
B.6	Totale energie . . . . .	133
	<b>Bibliografie</b>	<b>135</b>

# Abstract

In this paper we study the properties of two distinct topological excitations in mixed Bose-Einstein condensates, vortices and skyrmions. In order to do this, we choose a trial wave function for the system with the size of the excitation as a free parameter and we minimize the energy of the system as a function of this parameter. We consider the situation of a large condensate (much larger than the coherence length) and we assume that the components of a mixed condensate can be converted into each other.

In the first part we study the description of single and two-component Bose-Einstein condensates and we introduce the concept of 'pseudospin', which can be used to define a skyrmion.

In the second part we study a single vortex and a single skyrmion in a large condensate and we compare the energy of both states, resulting in a phase diagram. We also study the creation of skyrmions. We find that it is possible to create a skyrmion by a continuous deformation of the pseudospin texture of a single-component condensate, starting from the border of the condensate. Further research is needed to find out if this method is energetically more favourable than other methods.

In the third part we study the interaction potential of vortex-vortex, vortex-antivortex, skyrmion-skyrmion and skyrmion-antiskyrmion pairs. We show that it is important to include the effects of the variable size of the excitation in the case where the distance between both excitations is comparable to their size. In other cases it is a good approximation to take the size of the excitation equal to the size of a single excitation.

In the fourth part we study the behaviour of a Bose-Einstein condensate at the border of two neighbouring layers with different velocities. In a single component condensate, this can cause the formation of a vortex row or the formation of a phase slip line. We find that the vortex row is always energetically more favourable than the phase slip line. In a two-component condensate, a row of skyrmions or a skyrmion phase slip line might be formed. These solutions can only be stable up to a certain maximum velocity between the layers. We find that a row of skyrmions is probably always energetically more favourable than a skyrmion-phase slip line, but we cannot fully exclude the possibility of the existence of parameter values of the system for which the skyrmion-phase slip line is energetically more favourable.

In general we find that the size of the skyrmion is very sensitive to the parameters of the system and an important factor in determining their properties, especially when we consider their interaction. The size of the vortex state is less sensitive to the system parameters.



# Dankwoord

Een proefwerk komt nooit tot stand door het werk van één persoon. De steun en inbreng van verschillende mensen hebben bijgedragen tot de uiteindelijke vorm die u als lezer nu in handen heeft. Deze mensen wil ik hier dan ook bedanken.

In de eerste plaats wil ik mijn promotor Prof. dr. Tempere bedanken. Hij heeft me laten kennismaken met de wonderlijke wereld van de koude atomen en het intrigerende fenomeen van Bose-Einstein condensatie. Dit is geen gemakkelijke materie, maar toch slaagt hij er altijd in om dit op een heel eenvoudige en heldere wijze voor te stellen. Verder heeft hij ook de nodige structuur en duidelijke werknota's geboden, wat het mogelijk maakte om de thesis tijdens mijn Erasmus verblijf aan de Universiteit Utrecht (01/09/2010 - 30/06/2011) af te werken.

Tijdens mijn Erasmus verblijf heb ik kennis gemaakt met Prof. dr. Hermsen en dr. Peter Jonker van SRON (Netherlands Institute for Space Research). Hen wil ik bedanken voor de interessante achtergrond over neutronensterren en voor het aanbieden van een werkplek. Spijtig genoeg bleek deze materie te uitgebreid om ze in mijn masterthesis te integreren, maar toch wil ik iedereen van SRON bedanken voor de geweldige tijd die ik daar heb beleefd en voor de kennismaking met de astrofysische kant van wetenschappelijk onderzoek. Ik hoop dat ik de verzamelde gegevens in de toekomst nog zal kunnen gebruiken.

Een thesis maken op Erasmus is niet gemakkelijk. Je vertrekt uit je vertrouwde omgeving en je moet op een nieuwe plek je thuis maken. De steun die je krijgt van de vrienden die je ter plaatse maakt is hiervoor onontbeerlijk en daarvoor wil ik Renia Diamantopoulo, Ciro Pinto en Jelle De Plaa bedanken.

Aan de Universiteit Antwerpen wil ik iedereen van de onderzoeksgroep TQC (Theorie van Kwantum systemen en Complexe systemen) en in het bijzonder Jeroen Devreese, Nick Van den Broeck en Katrijn Putteneers bedanken voor de steun, de leuke sfeer en de Mathematica tips. Verder wil ik nog de professoren en assistenten bedanken waar ik door de jaren heen les van heb gehad. Ook Prof. dr. Schryvers, Prof. dr. Van Mechelen en Prof. dr. Van Remortel wil ik bedanken. Zij hebben me mee de weg gewezen binnen de uitgebreide onderzoeksdomeinen in de fysica.

Als laatste wil ik mijn ouders, mijn broer Timo en mijn vriend Jeroen bedanken. Zij hebben me een jaartje moeten missen, maar daarbij heb ik ook geleerd hoeveel ze juist voor mij betekenen. Vooral mijn ouders wil ik bedanken voor de kansen die ze mij al die jaren hebben gegeven, die me zowel vroeger als nu hebben toegelaten om mijn hart en mijn interesse te volgen. Zonder hen was ik nooit zover geraakt. Timo heeft me waarschijnlijk nog het meest gemist. Hij is echt een fantastische broer, een dankwoord kan hier geen recht aan doen. Jeroen wil ik bedanken voor zijn liefde en steun, die me toelaat en stimuleert om nog nét dat beetje meer uit mezelf te halen. Tot slot wil ik hen alle vier bedanken voor het aanhoren van de soms overenthousiaste uitleg over mijn thesis en voor het aandachtig nalezen van dit eindwerk.





# Inleiding

Bose-Einstein condensatie is een toestand van de materie waarbij alle deeltjes in dezelfde, macroscopische kwantumtoestand terecht komen [1]. Dit biedt een uniek, rechtstreeks venster op de kwantummechanica en is dan ook het onderwerp van uitgebreid hedendaags onderzoek in experimenten met ultrakoude atomaire gassen.

Een van de fenomenen die het onderwerp zijn van recent onderzoek, zijn topologische excitaties. Door de kwantummechanische aard van een Bose-Einstein condensaat, wordt elke excitatie gekarakteriseerd door een kwantumgetal. Dit kwantumgetal kan continu zijn of discreet. Een voorbeeld van een continu kwantumgetal is het golfgetal  $k$  van een geluidsgolf of dichtheidsgolf. Naarmate  $k$  naar nul gaat, bekomen we opnieuw een Bose-Einstein condensaat zonder excitatie. In een niet-ingeperkt condensaat kunnen we  $k$  continu naar nul laten gaan. Bij excitaties die gekarakteriseerd worden door een discreet kwantumgetal is dit echter niet het geval. Hierdoor kan men deze excitaties niet bekomen vanuit de grondtoestand door een continue vervorming van ofwel de dichtheid, ofwel de fase van het condensaat. De link met de tak 'topologie' van de wiskunde is niet ver te zoeken: deze bestudeert de eigenschappen van de ruimte die bewaard blijven bij een continue vervorming van de ruimte. Deze excitaties worden dan ook 'topologische excitaties' genoemd en het discrete kwantumgetal dat de excitaties karakteriseert is een 'topologische constante' (veelal een veelvoud van een zeker kwantum, bvb. het fluxkwantum). Ze kunnen enkel verschijnen door (1) transport vanuit een gebied zonder condensaat, via de rand van het condensaat, naar het centrum of (2) creatie van een paar excitaties, met tegengestelde topologische constante.

Het bekendste voorbeeld van een topologische excitatie is de vortex. Een vortex is equivalent met een draaikolk of een orkaan in de klassieke fysica. In een Bose-Einstein condensaat wordt een vortex gekarakteriseerd door zijn circulatie, die gekwantiseerd is in veelvouden van het circulatiekwantum  $h/m$ . De circulatie is dus de topologische constante die geassocieerd wordt met een vortex.

In mengsels van twee verschillende Bose-Einstein condensaten kunnen ingewikkeldere excitaties optreden, omdat we nu twee extra vrijheidsgraden hebben: de relatieve fase tussen de twee condensaten en hun dichtheidsverhouding. Dit heeft bvb. tot gevolg dat we het oog van een vortex van één component kunnen opvullen met condensaat van de andere component, en zo een skyrmion vormen. Een uitgebreidere definitie van skyrmionen en hun topologische constante (het windingsgetal  $Q$ ) volgt in sectie 2.4.

In dit eindwerk bestuderen we de eigenschappen van vortices en skyrmionen in gemengde Bose-Einstein condensaten. Dit is relevant voor hedendaagse experimenten in ultrakoude ijle gassen, maar ook in andere systemen. Ook twee-bandkloof supergeleiders kan men beschrijven aan de hand van twee types Cooper paren, elk met hun typische coherentielengte. Verder vermoedt men dat er in de mantel van neutronensterren een mengsel bestaat van superfluïde neutronen en supergeleidende protonen. In elk van deze realisaties komen de extra vrijheidsgraden van relatieve fase en dichtheidsverhouding voor, en is het zinvol om de eigenschappen van skyrmionen te bestuderen. In deze thesis beperken we ons tot mengsels van twee condensaten, waarbij elk condensaat elektrisch neutraal is. Op die manier is de beschrijving van het systeem beperkt tot twee Gross-Pitaevskii vergelijkingen voor de condensaatgolf functies, en moeten we ons geen zorgen maken over de koppeling met het magneetveld, en het magneetveld opgewekt door de superstromen. Verder nemen we aan dat de deeltjes van beide componenten in elkaar omgezet kunnen worden. In het eerste deel van dit werk gaan we dieper in op de achtergrond van deze beschrijving. In het tweede deel introduceren we de methode waarmee we vortices en skyrmionen zullen bestuderen en passen we deze toe op het geval van één vortex en het geval van één skyrmion in een groot condensaat. Daarna zullen we de eigenschappen en de energie van beide excitaties met elkaar vergelijken.

Zowel in neutronensterren als in twee-bandkloof supergeleiders is er recent heel wat interesse ontstaan rond roosters van topologische excitaties, en interacties tussen topologische excitaties. In neutronensterren brengt men de pinning en ontpinning van roosters vortices in verband met glitches - plotse veranderingen in de omwentelingsperiode van de ster [2]. In twee-bandkloof supergeleiders merkt men op dat de fluxlijnen geen rooster meer vormen, maar zich groeperen in slierten [3], wat wijst op een combinatie van attractieve en repulsieve interactie. Dit heeft er toe geleid dat men deze materialen type-1.5 supergeleiders noemt. Of deze fluxlijnen vortices of skyrmionen zijn, is nog niet helemaal duidelijk. In het derde deel van deze thesis dragen we bij tot de studie van interagerende topologische excitaties, via de bepaling van de interactiepotentiaal tussen twee vortices of twee skyrmionen.

In neutronensterren vermoedt men dat er grensgebieden voorkomen (bijvoorbeeld tussen binnen- en buitenmantel) waarin er een grote snelheidsgradiënt is. In kwantumvloeistoffen geeft een scheidingsvlak tussen twee gebieden met verschillende snelheden aanleiding tot een rij vortices, zoals beschreven door Feynman [4]. Zulke rijen vortices vertonen ook gelijkenissen met de slierten vortices waargenomen in de type-1.5 supergeleiders: interactie tussen de vortices is van belang om deze objecten goed te beschrijven. Wanneer de snelheidsgradiënt te groot wordt, en de vortices te dicht bij elkaar komen, kan het systeem overgaan naar een faseslijp. Fluxkwanta (of andere topologische kwanta) kunnen langs deze lijn getransporteerd worden, zonder dat er een transport aan condensaatdichtheid mee gepaard gaat. In het vierde deel van deze thesis onderzoeken we dit fenomeen in de context van kwantumgassen.

Tot slot hoop ik dat deze thesis u een overzicht kan geven van de belangrijkste eigenschappen van en verschillen tussen vortices en skyrmionen. Topologische excitaties zijn heel interessante en intrigerende fenomenen en ik hoop dat u net zoveel plezier beleeft aan het lezen van deze thesis als ikzelf heb beleefd aan het onderzoeken en schrijven ervan.

Deel I

**Achtergrond: Bose-Einstein  
Condensatie**



# Hoofdstuk 1

## Bose-Einstein condensatie met één component

In dit hoofdstuk gaan we dieper in op de achtergrond en de theoretische beschrijving van Bose-Einstein condensatie, waarbij we vertrekken vanuit de Gross-Pitaevskii energiefunctieaal. Daarna zullen we enkele eenvoudige resultaten afleiden, die de bijzondere eigenschappen van een Bose-Einstein condensaat illustreren en verder ook nuttig zullen blijken in de latere berekeningen. Vervolgens bekijken we de basis eigenschappen van een vortex, de eerste topologische excitatie die we hier zullen beschouwen. Tot slot bekijken we de Gross-Pitaevskii energiefunctieaal in een roterend assenstelsel.

### 1.1 Bose-Einstein condensatie

Bose-Einstein condensatie is een puur kwantummechanische fase waarbij alle deeltjes in dezelfde kwantumtoestand terechtkomen [1]. De kwantummechanische toestand wordt macroscopisch. Dit gebeurt bij zeer lage temperatuur.

Deeltjes in een klassiek gas zijn verdeeld volgens de Maxwell-Boltzmann verdeling en er geldt

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{3}{2}k_B T \\ &= \frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle \\ &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \end{aligned} \tag{1.1}$$

Atomen in een koud gas zullen dus gemiddeld trager bewegen dan in een warm gas. Het verband tussen de spreiding op de plaats en de spreiding op de impuls wordt gegeven door de onzekerheidsrelatie van Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p > \frac{h}{4\pi} \tag{1.2}$$

Als de temperatuur daalt, daalt de spreiding  $\Delta p$  op de impuls. Om aan de onzekerheidsrelatie te blijven voldoen, moet de spreiding  $\Delta x$  op de positie van de atomen dus toenemen. De Broglie geeft ons de golflengte van de atomen in een gas bij een bepaalde temperatuur:

$$\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}} \tag{1.3}$$

Bij kamertemperatuur is de golflengte van de atomen veel kleiner dan de interatomaire afstand, maar bij zeer lage temperatuur zijn deze ongeveer gelijk en beginnen de golf functies van de verschillende atomen met elkaar te overlappen. Er zijn dan twee gevallen mogelijk: ofwel zijn de deeltjes fermionen, ofwel zijn het

bosonen. Als de deeltjes fermionen zijn, kunnen ze zich door het Pauli-uitsluitingsbeginsel niet in dezelfde energietoestand bevinden. Als de deeltjes bosonen zijn, kunnen ze zich wel in dezelfde energietoestand bevinden. De golffuncties van de deeltjes zullen zich op elkaar afstemmen: er ontstaat een ééndeeltjestoestand bezet door meerdere bosonen met dezelfde golffunctie en fase.



Figuur 1.1: Bij afkoeling zullen de golffuncties van de verschillende atomen breder worden, elkaar overlappen en zich op elkaar afstemmen, tot ze uiteindelijk allemaal in dezelfde toestand terecht komen.

Er zijn twee methoden om deze toestand te bereiken. De eerste methode is het afkoelen van een ijl gas, wat overeenkomt met het vergroten van de golflengte van de deeltjes. Dit gebeurt door de deeltjes op te sluiten in een magnetische val en ze met laserkoeling te vertragen, dus af te koelen (Nobelprijs 1996). Als we het gas nog verder afkoelen tot op enkele tientallen tot honderden nanokelvin met verdampingskoeling, ontstaat er een compact gebiedje van hogere dichtheid in het wolkje atomen, waarin bij verdere afkoeling alle atomen terecht komen. Dit is een Bose-Einstein condensaat. Alle atomen verzamelen zich in de grondtoestand van de val met een snelheidsverdeling gepiekt rond nul. Ze zijn in fase: als we experimenteel twee verschillende wolkjes laten overlappen vormen ze niet één grote wolk, maar zien we interferentie. Deze toestand werd voor het eerst experimenteel gerealiseerd en waargenomen in 1995 (Nobelprijs 2001), hoewel deze reeds in 1924 werd voorspeld door Bose en Einstein.

De eerste experimenteel gerealiseerde Bose-Einstein condensaten bestonden uit natrium-23 of rubidium-87 atomen, dus uit bosonische atomen. Later is men er ook in geslaagd Bose-Einstein condensatie van paren van fermionische atomen te realiseren [5]. Aangezien het Pauli-uitsluitingsbeginsel verhindert dat fermionen in dezelfde toestand terechtkomen, moeten de fermionen hiervoor opgepaard worden tot bosonische fermionparen. Deze paren kunnen wel condenseren tot een Bose-Einstein condensaat.

De tweede methode om Bose-Einstein condensatie te bereiken is het vergroten van de dichtheid, wat overeenkomt met het verkleinen van de interatomaire afstand. Experimenteel werd dit gerealiseerd in [6]. Verder vermoedt men dat dit ook gerealiseerd wordt in neutronensterren [7]. Daar heersen dergelijk grote dichtheden, dat men verwacht dat Bose-Einstein condensatie van neutronparen zelfs bij de heersende temperaturen van minstens  $10^6 K$  in de binnenkorst gerealiseerd wordt.

We zullen verder Bose-Einstein condensatie regelmatig afkorten, door bvb. condensaat of BEC te gebruiken. Condensaat en BEC verwijzen beiden naar een Bose-Einstein condensaat, tenzij uitdrukkelijk anders vermeld.

## 1.2 De Gross-Pitaevskii vergelijking

Om een condensaat te beschrijven, beschouwen we een systeem van  $N$  zwak interagerende atomen in de grondtoestand. De gezamenlijke golffunctie van het systeem kunnen we dan benaderend schrijven als het product van de afzonderlijke golffuncties [1]:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{j=1}^N \varphi(\mathbf{r}_j) \quad (1.4)$$

Dit is de golffunctie van het condensaat. De best passende ééndeeltjesgolffunctie hoeft niet gelijk te zijn aan de grondtoestand van de val waarin de deeltjes opgesloten zitten: de interactie energie moet ook in rekening gebracht worden. We zoeken nu een vergelijking die de toestand van deze golffunctie

beschrijft, dus een uitdrukking voor de vergelijking  $E[\Psi] = H[\Psi]$ . Daarvoor hebben we de Gross-Pitaevskii energiefunctionaal  $E_{GP}[\Psi]$  nodig [8] [9].

$$E_{GP}[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right\} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

Deze geeft ons de totale energie van een condensaat met golffunctie  $\Psi$ . De eerste term is de kinetische energie. De tweede term is de potentiële energie van het condensaat in de val en de derde term is de interactie energie. De interactieconstante  $g$  wordt gegeven door

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \quad (1.6)$$

met  $a_s$  de s-golf verstrooiingslengte en  $m$  de massa van de condensaatdeeltjes (bvb bosonische atomen in een magnetische val of neutronparen in een neutronenster). De best passende golffunctie is de toestand die de totale energie van het condensaat minimaliseert, met als randvoorwaarde dat het totale aantal deeltjes  $N$  in het condensaat constant blijft.

$$\frac{\delta E_{GP}}{\delta \Psi^*} - \mu \frac{\delta N}{\delta \Psi^*} = 0 \quad (1.7)$$

$$N = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \quad (1.8)$$

Als we deze minimalisatie uitwerken met behulp van functionaalanalyse, bekomen we de Gross-Pitaevskii vergelijking.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r})|^2 \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

Deze beschrijft een Bose-Einstein condensaat bij temperatuur nul het beste, want het beschrijft de situatie waarin het aantal deeltjes in het condensaat maximaal is [8] [9]. Bij hogere temperaturen moeten er fluctuaties in rekening gebracht worden. Het is een niet-lineaire Schrödingervergelijking met  $\mu$  i.p.v.  $E$ . Om de eigenschappen van deze vergelijking te bestuderen, zullen we ze toepassen in een aantal specifieke situaties.

### 1.2.1 Uniform condensaat

In de Gross-Pitaevskii vergelijking blijft de multiplicator van Lagrange  $\mu$  nog onbepaald. Om een schatting en een interpretatie voor  $\mu$  te bekomen, beschouwen we de vergelijking in het geval van een homogeen condensaat binnen een volume  $V$ .  $\Psi(\mathbf{r})$  is dan een constante, onafhankelijk van  $\mathbf{r}$ . Uit de bindingsvoorwaarde (1.8) bekomen we

$$N = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = |\Psi|^2 V \quad (1.10)$$

$$\Leftrightarrow |\Psi|^2 = \frac{N}{V} = n \quad (1.11)$$

met  $n$  de deeltjesdichtheid. De externe potential  $V(\mathbf{r})$  is dan een oneindige potentiaalput. Als we voor dit geval de Gross-Pitaevskii vergelijking (1.9) uitwerken, vinden we dat

$$\mu = ng \quad (1.12)$$

We noemen  $\mu$  de chemische potentiaal. Het is een uitdrukking voor de energie die nodig is om een deeltje aan het condensaat toe te voegen of uit het condensaat weg te trekken. Wanneer we deze uitdrukking voor  $\mu$  invullen in de uitdrukking voor de energie (1.5) (rekening houdend met de bindingsvoorwaarde), vinden we

$$\begin{aligned} E_{GP}[\Psi] - \mu N &= \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 - \mu \right\} \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \int_V d\mathbf{r} \left\{ \frac{g}{2} |\Psi|^4 - \mu |\Psi|^2 \right\} = V \left\{ \frac{g}{2} n^2 - gn^2 \right\} = -\frac{gn^2}{2} V \end{aligned} \quad (1.13)$$

De energie nodig om één volume-eenheid van het condensaat te vernietigen is dus  $\frac{gn^2}{2} = \mu \frac{n}{2}$ .

### 1.2.2 Gedrag van het condensaat aan een wand

We bekijken de golffunctie  $\Psi(x)$  van een ééndimensionaal condensaat aan een wand. De externe potentiaal  $V_1(\vec{r})$  is dan gegeven door

$$V_1(\vec{r}) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases} \quad (1.14)$$

We veronderstellen dat het condensaat ver weg van de wand uniform is met dichtheid  $n$ , zodat  $\mu = gn$ . Op de wand zelf is de dichtheid nul. Verder veronderstellen we dat de snelheid van het condensaat nul is. We zoeken het gedrag van het condensaat in de buurt van de wand. We moeten dus volgende ééndimensionale Gross-Pitaevskii vergelijking oplossen met de bijbehorende randvoorwaarden:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + g \cdot |\Psi(x)|^2 \Psi(x) = \mu\Psi(x) \quad (1.15)$$

$$|\Psi(0)| = 0 \quad (1.16)$$

$$|\Psi(+\infty)|^2 = n \quad (1.17)$$

Hiervoor herschalen we eerst de golffunctie:  $f(x) = \frac{|\Psi(x)|}{\sqrt{n}}$ . Invullen van uitdrukking (1.6) voor  $g$  levert dan

$$\frac{1}{8\pi n a_s} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = f^3(x) - f(x) \quad (1.18)$$

We vinden hier een typische lengteschaal voor het condensaat terug: de coherentielente  $\xi$ .

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi n a_s}} \quad (1.19)$$

Daarmee kunnen we de vergelijking verder dimensieloos maken, via  $\tilde{x} = \frac{x}{\xi}$ .

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \tilde{x}^2} = f^3 + f \quad (1.20)$$

Dit is een vergelijking met een bekende analytische oplossing, nl.

$$f(\tilde{x}) = \tanh\left(\frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}}\right) \quad (1.21)$$

Dit profiel wordt weergegeven in figuur 1.2. Omvormen naar  $|\Psi(x)|^2$  levert

$$|\Psi(x)|^2 = n \tanh^2\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) \quad (1.22)$$

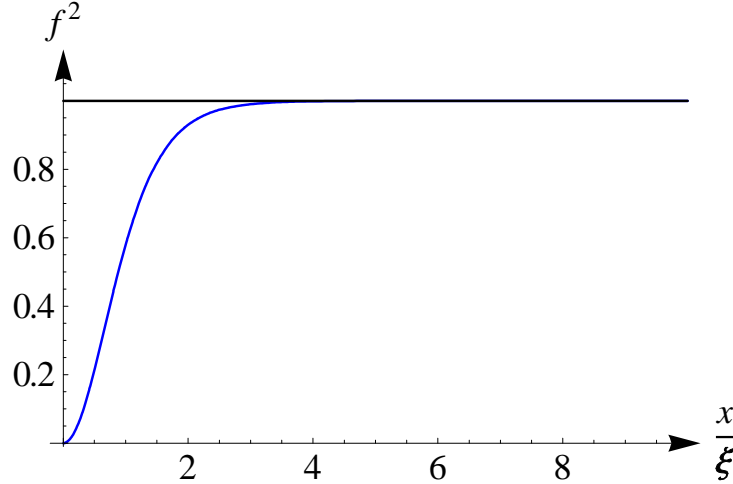
Hierbij zien we dat de dichtheid  $|\Psi(x)|^2$  zijn bulkwaarde bereikt op een afstand van de orde van de coherentielente  $\xi$  van de wand. De coherentielente is dus een uitdrukking voor de kleinste lengteschaal waarover de dichtheid van het condensaat van nul kan groeien tot de bulkwaarde. Daarom wordt dit ook de 'healing length' genoemd: als we de condensaatdichtheid dwingen om op een bepaalde plaats naar nul te gaan, zal de dichtheid onderdrukt worden in een gebied ter grootte van  $\xi$  rond de plaats waar de dichtheid nul is.

### 1.3 Dynamica van het condensaat

Om de dynamica van het condensaat te beschrijven moeten we de Gross-Pitaevskii vergelijking (1.9) veralgemenen tot een tijdsafhankelijke vergelijking [10].

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1.23)$$





Figuur 1.2: Dichtheidsprofiel van een condensaat aan een wand.

Wanneer we de tijdsafhankelijke Gross-Pitaevskii vergelijking vermenigvuldigen met  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$  en vervolgens hiervan de complex geconjugeerde vergelijking aftrekken, bekomen we

$$\frac{\partial |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)] \right\} = 0 \quad (1.24)$$

Deze uitdrukking heeft duidelijk de vorm van een continuïteitsvergelijking voor de dichtheid  $n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  van het condensaat,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = 0 \quad (1.25)$$

Hiermee definiëren we de snelheid  $\mathbf{v}$  van het condensaat als

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{2mi} \frac{[\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*]}{|\Psi|^2} \quad (1.26)$$

De continuïteitsvergelijking drukt het behoud van het totale aantal condensaatdeeltjes uit. We kunnen de uitdrukking voor de snelheid nog vereenvoudigen door de golf functie te schrijven als een modulus en een fase,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)} \quad (1.27)$$

Dit is de zogenaamde hydrodynamische beschrijving. Hieruit volgt dat

$$n = |\Psi|^2 = \rho^2 \quad (1.28)$$

en

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta \quad (1.29)$$

Dit is een heel belangrijk resultaat: de snelheid van het condensaat is gegeven door de gradiënt van de fase van  $\Psi$ . We nemen hiervan de rotor:

$$\nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla \theta = 0 \quad (1.30)$$

Het snelheidsveld van het condensaat is dus irrotationeel!

Een andere belangrijke eigenschap van het condensaat is dat het wrijvingsloos vloeit, maar deze eigenschap hebben we hier niet afgeleid. We noemen zo'n irrotationele, wrijvingsloze vloeistof beschreven door een macroscopische golf functie een "superfluidum".

### 1.3.1 Vortices

Een vortex bestaat uit een lijn, waarrond de circulatie niet nul is. Er ontstaat dus stroming rond de lijn. Bekende klassieke vortices zijn orkanen, draaikolken en galaxieën. Om de eigenschappen van 'kwantum' vortices in een Bose-Einstein condensaat te bestuderen, bekijken we de stroming langs een gesloten lus C rond een lijn in het condensaat. Abrupte faseveranderingen zijn niet mogelijk: de golffunctie  $\Psi$  moet na een volledige wandeling door C dezelfde waarde hebben. Het faseverschil tussen begin- en eindpunt is dus een geheel veelvoud van  $2\pi$ ,  $\Delta\theta = 2\pi n_v$  met  $n_v \in \mathbb{N}$ . Als C cirkelvormig is met straal  $r$ , is de lengte van de lus gelijk aan de omtrek van de cirkel,  $\Delta L = 2\pi r$ . In de veronderstelling dat de fasegradiënt constant is langs de lus, geldt dan

$$v = \frac{\hbar}{m} \frac{\Delta\theta}{\Delta L} = \frac{\hbar n_v}{mr} \quad (1.31)$$

Uit de continuïteit van de golffunctie leiden we dus af dat het snelheidsveld van het condensaat rond de lijn gekwantiseerd is en omgekeerd evenredig met de afstand tot de lijn.

Het snelheidsveld dat we zonet hebben gevonden, beschrijft de rotatie van het condensaat rond de lijn. We hebben echter eerder gevonden dat het condensaat irrotatieel is. Zijn deze twee stellingen wel verenigbaar? Om dit na te gaan, berekenen we de circulatie langs de gesloten, cirkelvormige lus C die zich volledig in het condensaat bevindt.

$$\kappa = \oint_C \vec{v} \cdot d\vec{l} = \frac{\hbar n_v}{mr} 2\pi r = \frac{h}{m} n_v \quad (1.32)$$

We zien dus dat  $h/m$  het kwantum van circulatie is. Als we anderzijds de stelling van Stokes toepassen op het integrandum en gebruiken dat het snelheidsveld irrotatieel is ( $\vec{\nabla} \times \vec{v} = 0$ ), vinden we

$$\kappa = \oint_C \vec{v} \cdot d\vec{l} = \int_S (\vec{\nabla} \times \vec{v}) \cdot d\vec{S} = 0 \quad (1.33)$$

met S het oppervlak ingesloten door de lus C. Hier zien we dus een tegenstrijdigheid: een vortex betekent circulatie in de vloeistof, maar de circulatie is nul. Kunnen er dus wel vortices bestaan in een Bose-Einstein condensaat? De oplossing van het probleem is dat de stelling van Stokes niet geldt als er zich een 'gat' of singulariteit in het condensaat bevindt, waar de condensaatdichtheid nul is.

We hebben nu alle ingrediënten om een formele definitie van een vortex samen te stellen. Een vortex in een Bose-Einstein condensaat is een topologische lijn-singulariteit, waarbij geldt dat als je in een gesloten lus rond de lijn wandelt, de fase van de macroscopische golffunctie met een geheel (en niet nul) aantal keren  $2\pi$  verandert. De topologische constante die een vortex karakteriseert is de circulatie.

We kunnen nu ook het angulaire moment van een vortex in een homogeen condensaat berekenen. Het draaimoment rondom een as  $\mathbf{e}_\Omega$  wordt gegeven door

$$\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle = m \int d\mathbf{r} \rho^2 [\mathbf{v}_s \cdot (\mathbf{e}_\Omega \times \mathbf{r})] \quad (1.34)$$

Voor een vortex langs de z-as, is dit gegeven door

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{L}} \rangle &= m \int_0^\infty r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{+\infty} dz \rho^2(r, z) \left[ \frac{\kappa}{2\pi r} \mathbf{e}_\theta \cdot (\mathbf{e}_z \times r \mathbf{e}_r) \right] \\ &= n_v \hbar \int_0^\infty r dr \int_{-\infty}^{+\infty} dz r \rho^2(r, z) \end{aligned} \quad (1.35)$$

Als we gebruiken dat  $N = 2\pi \int_0^\infty r dr \int_{-\infty}^{+\infty} dz r \rho^2(r, z)$  het totaal aantal deeltjes is, bekommen we dat  $n_v \hbar$  het draaimoment per deeltje is.

$$\frac{\langle \hat{\mathbf{L}} \rangle}{N} = n_v \hbar \quad (1.36)$$

Het draaimoment per deeltje van een vortex in een homogeen condensaat is dus constant.

## 1.4 Gross-Pitaevskii energiefunctonaal in een roterend assenstelsel

Vortices worden experimenteel opgewekt in een roterend condensaat. Als we het condensaat willen roteren, moeten we de 'emmer' of invangspotentiaal  $V(\mathbf{r})$  waarin het condensaat zich bevindt met een bepaalde snelheid laten roteren. Het laboratorium-referentiestelsel is dan niet langer het best gepaste referentiestelsel, omdat de roterende wanden van de 'emmer' een tijdsafhankelijke potentiaal voorstellen die werk kan leveren op het systeem. Als we dit probleem willen vereenvoudigen, moeten we de Gross-Pitaevskii vergelijking dus transformeren naar een meedraaiend assenstelsel waarin de potentiaal  $V(\mathbf{r})$  stationair is. Deze uitwerking wordt beschreven in bijlage A. Het resultaat wordt gegeven door

$$E_{GP}[\Psi] = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.37)$$

of, in de hydrodynamische notatie  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$ , door

$$\begin{aligned} E_{GP}[\rho, \theta] - \mu N = & \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2m} |-i\hbar \nabla \rho|^2 + \frac{1}{2} m \rho^2 [\mathbf{v}_s - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 \right\} \\ & + \int d\mathbf{r} \left[ (\tilde{V}(\mathbf{r}) - \mu) + \frac{g}{2} \rho^2 \right] \rho^2 \end{aligned} \quad (1.38)$$

met

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) - \frac{m}{2} (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \quad (1.39)$$

We bekijken de betekenis van de verschillende termen in (1.38). De eerste term is de kwantumdruk: de energie nodig om de modulus van de condensaatgolffunctie te verbuigen. De tweede term is de kinetische energie van het condensaat in het roterende assenstelsel. De derde en vierde term zijn interactietermen. De derde term is de energie nodig om de condensaatdeeltjes in de invangingspotentiaal in te vangen, waarbij de chemische potentiaal het totale aantal deeltjes vastlegt. De vierde term is te wijten aan interatomaire interacties. Merk op dat we in  $\tilde{V}$  niet alleen de invangspotentiaal, maar ook de centrifugale potentiaal  $-\frac{m}{2} (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2$  hebben geabsorbeerd.



## Hoofdstuk 2

# Bose-Einstein condensatie met 2 componenten

In dit hoofdstuk breiden we de resultaten van het voorgaande hoofdstuk uit naar een condensaat met twee componenten. We zullen hierbij de nadruk leggen op de verschillende beschrijvingen die gebruikt worden om een dergelijk condensaat te beschrijven, meer bepaald de spinor en de pseudospin notatie. Daarna vergelijken we de behandeling van twee verschillende regimes met elkaar. In het eerste regime kunnen beide componenten in elkaar omgezet worden en kan de verhouding tussen de deeltjesdichtheden van beide condensaten variëren. In het tweede regime kunnen beide componenten niet in elkaar omgezet worden en ligt de verhouding tussen de deeltjesdichtheden van beide componenten vast. Beide regimes bekijken we bij constante chemische potentiaal.

### 2.1 De Gross-Pitaevskii energie functionaal

We beschouwen een Bose-Einstein condensaat met twee componenten. Deze worden elk beschreven door een eigen golffunctie, respectievelijk  $\Psi_1(\mathbf{r})$  en  $\Psi_2(\mathbf{r})$ . De verschillende componenten kunnen bvb. bestaan uit twee hyperfijn toestanden van eenzelfde isotoop, twee verschillende soorten atomen of protonparen en neutronparen. Naar analogie met de Gross-Pitaevskii energiefunctie voor het ééncomponentenscondensaat, kunnen we nu ook de Gross-Pitaevskii energiefunctie voor een condensaat met twee componenten opstellen. Deze wordt gegeven door

$$\begin{aligned} E_{GP}[\Psi_1, \Psi_2] = & \int d\mathbf{r} \Psi_1^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1(\mathbf{r}) + \frac{g_{11}}{2} |\Psi_1(\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ & + \int d\mathbf{r} \Psi_2^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_2(\mathbf{r}) + \frac{g_{22}}{2} |\Psi_2(\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_2(\mathbf{r}) \\ & + \int d\mathbf{r} g_{12} |\Psi_1(\mathbf{r})|^2 |\Psi_2(\mathbf{r})|^2 \\ & - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R [\Psi_1^*(\mathbf{r}) \Psi_2(\mathbf{r}) + \Psi_1(\mathbf{r}) \Psi_2^*(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (2.1)$$

Merk op dat dit reeds de Gross-Pitaevskii energiefunctie in een roterend assenstelsel is. De eerste twee termen beschrijven de energie van de afzonderlijke componenten, zonder rekening te houden met de andere component. De derde en vierde term beschrijven de interactie energie tussen de twee condensaten. De derde term beschrijft de interatomaire interacties tussen de atomen van het eerste en de atomen van het tweede condensaat. De vierde term komt enkel voor als beide componenten in elkaar omgezet kunnen worden, zoals het geval is als de componenten twee hyperfijn toestanden zijn van hetzelfde atoom (bvb.  $^{87}\text{Rb}$ ). In dat geval kunnen de twee toestanden gekoppeld worden door een radiofrequent elektromagnetisch veld en is  $\omega_R$  de Rabi-frequentie.

Analoog aan het geval met één component, kunnen we hier ook de Gross-Pitaevskii vergelijking afleiden, door minimalisatie van de Gross-Pitaevskii energiefunctie naar  $\Psi_1(\mathbf{r})$  en  $\Psi_2(\mathbf{r})$  onder de voorwaarde

dat het totale aantal deeltjes  $N$  constant blijft, met  $N = \int d\mathbf{r} \left( |\Psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\Psi_2(\mathbf{r})|^2 \right)$ . Dit levert een stelsel van twee differentiaalvergelijkingen op.

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_1 + V_1 \Psi_1 + g_{11} |\Psi_1|^2 \Psi_1 + g_{12} |\Psi_2|^2 \Psi_1 - \hbar\omega_R \Psi_2 = \mu \Psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_2 + V_2 \Psi_2 + g_{22} |\Psi_2|^2 \Psi_2 + g_{12} |\Psi_1|^2 \Psi_2 - \hbar\omega_R \Psi_1 = \mu \Psi_2 \end{cases} \quad (2.2)$$

Het is duidelijk dat dit stelsel aan vergelijking enkel analytisch oplosbaar is in de meest eenvoudige gevallen. Daarom zullen we verder altijd met de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal werken, waarbij we de variationele methode uit hoofdstuk 3 gebruiken om een benaderende oplossing te vinden.

## 2.2 Continuïteitsvergelijking en superfluïde snelheid

Opnieuw analoog aan het geval met één component, kunnen we de tijdsafhankelijke Gross-Pitaevskii vergelijking uitbreiden tot een tijdsafhankelijke vergelijking.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi_i(\mathbf{r}, t) \quad (2.3)$$

Dit levert

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_1 + V_1 \Psi_1 + g_{11} |\Psi_1|^2 \Psi_1 + g_{12} |\Psi_2|^2 \Psi_1 - \hbar\omega_R \Psi_2 = i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_2 + V_2 \Psi_2 + g_{22} |\Psi_2|^2 \Psi_2 + g_{12} |\Psi_1|^2 \Psi_2 - \hbar\omega_R \Psi_1 = i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \end{cases} \quad (2.4)$$

We vermenigvuldigen de eerste vergelijking met  $\Psi_1^*$  en de tweede vergelijking met  $\Psi_2^*$ . Vervolgens trekken we van beide vergelijkingen zijn complex geconjugeerde af.

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_1^* \nabla \Psi_1 - \Psi_1 \nabla \Psi_1^*] \right\} + \frac{\omega_R}{i} [\Psi_1^* \Psi_2 - \Psi_1 \Psi_2^*] = -\frac{\partial |\Psi_1|^2}{\partial t} \\ \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_2^* \nabla \Psi_2 - \Psi_2 \nabla \Psi_2^*] \right\} + \frac{\omega_R}{i} [\Psi_2^* \Psi_1 - \Psi_2 \Psi_1^*] = -\frac{\partial |\Psi_2|^2}{\partial t} \end{cases} \quad (2.5)$$

Om dit stelsel in de vorm van een continuïteitsvergelijking te brengen, tellen we beide vergelijkingen bij elkaar op. Het deel dat nog afhankelijk is van de Rabi-frequentie  $\omega_R$  valt dan weg.

$$\nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_1^* \nabla \Psi_1 - \Psi_1 \nabla \Psi_1^*] + \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_2^* \nabla \Psi_2 - \Psi_2 \nabla \Psi_2^*] \right\} + \frac{\partial [|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2]}{\partial t} = 0 \quad (2.6)$$

Dit is een continuïteitsvergelijking van de vorm

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_{s,eff}) = 0 \quad (2.7)$$

met als dichtheid

$$n = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 \quad (2.8)$$

en als superfluïde snelheid

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \frac{\left[ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_1^* \nabla \Psi_1 - \Psi_1 \nabla \Psi_1^*] + \frac{\hbar}{2mi} [\Psi_2^* \nabla \Psi_2 - \Psi_2 \nabla \Psi_2^*] \right]}{|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2} \quad (2.9)$$

## 2.3 Verschillende beschrijvingen

### 2.3.1 Spinor notatie

De golffuncties zijn complexe functies. Complexe functies bestaan uit twee reële functies. Voor een eventuele numerieke behandeling is het veel eenvoudiger om met reële functies te werken dan met complexe functies.

Daarom gaan we over op de hydrodynamische beschrijving uit (1.27), waarbij we de golffunctie beschrijven aan de hand van een complexe functie en een fase. Om onze notatie nog eleganter te maken, schrijven we de golffuncties van de twee componenten als een twee-spinor.

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1(\mathbf{r}) e^{i\theta_1(\mathbf{r})} \\ \rho_2(\mathbf{r}) e^{i\theta_2(\mathbf{r})} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Deze notatie geeft echter onvoldoende weer dat beide golffuncties aan elkaar gekoppeld zijn. Daarom gaan we over op een nieuwe notatie, waarbij we de totale dichtheid en de totale fase definiëren als

$$n_T(\mathbf{r}) = n_1(\mathbf{r}) + n_2(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

$$\rho_T(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho_1^2(\mathbf{r}) + \rho_2^2(\mathbf{r})} \quad (2.12)$$

$$\theta_T = \frac{\theta_1(\mathbf{r}) + \theta_2(\mathbf{r})}{2} \quad (2.13)$$

Om een volledige beschrijving van het condensaat te bekomen, moeten we nog de menghoek (mixing angle)  $\alpha_{mix}(\mathbf{r})$  en de relatieve fase  $\phi(\mathbf{r})$  definiëren via

$$\begin{cases} \rho_1(\mathbf{r}) = \rho_T(\mathbf{r}) \cos\left(\frac{\alpha_{mix}(\mathbf{r})}{2}\right) \\ \rho_2(\mathbf{r}) = \rho_T(\mathbf{r}) \sin\left(\frac{\alpha_{mix}(\mathbf{r})}{2}\right) \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\begin{cases} \theta_1(\mathbf{r}) = \theta_T(\mathbf{r}) - \frac{\phi(\mathbf{r})}{2} \\ \theta_2(\mathbf{r}) = \theta_T(\mathbf{r}) + \frac{\phi(\mathbf{r})}{2} \end{cases} \Rightarrow \phi(\mathbf{r}) = \theta_2(\mathbf{r}) - \theta_1(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

De extra factor  $\frac{1}{2}$  is niet willekeurig gekozen, maar zal later onze verdere berekeningen vereenvoudigen. De spinor van de condensaat golffuncties wordt dan gegeven door

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \rho_T(\mathbf{r}) e^{i\theta_T(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} \cos\left[\frac{\alpha_{mix}(\mathbf{r})}{2}\right] e^{-i\frac{\phi(\mathbf{r})}{2}} \\ \sin\left[\frac{\alpha_{mix}(\mathbf{r})}{2}\right] e^{i\frac{\phi(\mathbf{r})}{2}} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

In deze notatie wordt de superfluïde snelheid uit (2.9) gegeven door

$$v_{s,eff} = \frac{\hbar}{m} \left\{ \nabla\theta_T(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}(\mathbf{r})] \nabla\phi(\mathbf{r}) \right\} \quad (2.17)$$

Deze uitdrukking is een grote vereenvoudiging tegenover (2.9), wat illustreert waarom we de spinor notatie invoeren.

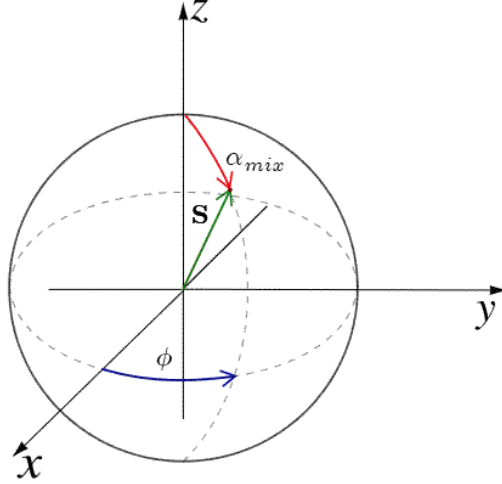
### 2.3.2 De pseudospin

Voor we de Gross-Pitaevskii energiefunctionaal omschrijven naar onze spinor notatie, is het interessant om de verwachtingswaarden van de Pauli-matrices berekenen. Hiermee definiëren we de pseudospin

$$\mathbf{S} = \frac{\langle \Psi | \boldsymbol{\sigma} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi | \boldsymbol{\sigma} | \Psi \rangle}{\rho_T^2(\mathbf{r})} \quad (2.18)$$

Het voordeel van deze notatie, is dat we hiermee de uiteindelijke uitdrukking voor de energie sterk kunnen vereenvoudigen. We werken nu één voor één deze verwachtingswaarden uit, te beginnen met de x-component.

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\langle \Psi | \sigma_x | \Psi \rangle}{\rho_T^2(\mathbf{r})} \\ &= \frac{1}{\rho_T^2(\mathbf{r})} \begin{pmatrix} \Psi_1^*(\mathbf{r}) & \Psi_2^*(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}) \\ \Psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ &= \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) (e^{-i\phi} + e^{i\phi}) \end{aligned} \quad (2.19)$$



Figuur 2.1: De menghoek  $\alpha_{mix}$  en de relatieve fasehoek  $\phi$  definiëren samen een vector van lengte 1: de pseudospin  $\mathbf{S}$ .

$$\Rightarrow S_x = \sin \alpha_{mix} \cos \phi \quad (2.20)$$

Hier zien we het nut van het invoeren van de halfjes bij onze definitie van de hoeken. Analoog kunnen we ook  $S_y$  en  $S_z$  berekenen.

$$S_y = \frac{\langle \Psi | \sigma_y | \Psi \rangle}{\rho_T^2(\mathbf{r})} = \sin \alpha_{mix} \sin \phi \quad (2.21)$$

$$S_z = \frac{\langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle}{\rho_T^2(\mathbf{r})} = \cos \alpha_{mix} \quad (2.22)$$

Samengevat bekomen we dus

$$\begin{cases} S_x = \sin \alpha_{mix} \cos \phi \\ S_y = \sin \alpha_{mix} \sin \phi \\ S_z = \cos \alpha_{mix} \end{cases} \quad (2.23)$$

Dit zijn de cartesiaanse componenten van de bolcoördinaten voor  $r = 1$  (zie figuur 2.1). Hieruit blijkt dat de pseudospin kan voorgesteld worden als een vector met lengte 1. De projectie op de z-as duidt de fractie  $\frac{\rho_1}{\rho_T}$  aan. 'pseudospin up' betekent in dit geval dus 100% type 1 condensaat, terwijl 'pseudospin down' 100% type 2 condensaat betekent. De azimutale hoek  $\phi$  geeft de relatieve fase tussen de twee condensaatfracties aan.

We hebben nu dus twee nieuwe mogelijke notaties voor onze energiefunctieaal:  $E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \alpha_{mix}, \phi]$  en  $E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}]$ . Merk wel op dat de eerste functie afhangt van vier variabelen, terwijl de tweede functie afhangt van vijf variabelen ( $\mathbf{S}$  heeft drie verschillende componenten). Bij onze pseudospin notatie moeten we dus goed in het achterhoofd houden dat  $|\mathbf{S}| = 1$ . Deze bindingsvoorwaarde zal ervoor zorgen dat het feitelijke aantal vrijheidsgraden van de functie beperkt blijft tot vier.

### 2.3.3 De Gross–Pitaevskii energiefunctieaal in pseudospin notatie

We vullen eerst de spinor notatie uit (2.16) in de energiefunctieaal (2.1) in en vervolgens zetten we dit om naar de pseudospin notatie uit (2.23). De volledige uitwerking is terug te vinden in bijlage B. In het geval dat de opsluitingspotentiaal en de massa van beide soorten deeltjes gelijk is ( $V_1(\mathbf{r}) = V_2(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ ,



$m_1 = m_2 = m$ ), levert dit [16]

$$E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{8m} \rho_T^2 (\nabla \mathbf{S})^2 + \frac{m}{2} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 + \rho_T^2 (\tilde{V} - \mu) + \frac{\rho_T^4}{2} [c_0 + c_1 S_z + c_2 S_z^2] - \hbar \omega_R \rho_T^2 S_x \right\} \quad (2.24)$$

met als effectieve snelheid

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \frac{\hbar}{m} \left\{ \nabla \theta_T - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}(\mathbf{r})] \nabla \phi \right\} \quad (2.25)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \left\{ \nabla \theta_T + \frac{1}{2} S_z \left( \frac{S_y \nabla S_x - S_x \nabla S_y}{S_x^2 + S_y^2} \right) \right\}, \quad (2.26)$$

als effectieve potentiaal

$$\tilde{V} = V - m \frac{\rho_T^2}{2} (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 = V - \frac{1}{2} \Omega^2 \tilde{I} \quad (2.27)$$

en als interactieconstanten

$$c_0 = \frac{g_{11} + g_{22} + 2g_{12}}{4} \quad (2.28)$$

$$c_1 = \frac{g_{11} - g_{22}}{2} \quad (2.29)$$

$$c_2 = \frac{g_{11} + g_{22} - 2g_{12}}{4} \quad (2.30)$$

Het is leerzaam om even stil te staan bij de betekenis van de verschillende termen. De eerste drie termen vormen samen de kinetische energie. De eerste term is de kwantumdruk, die we ook terugvonden voor één component. De tweede term, evenredig met  $(\nabla \mathbf{S})^2$ , geeft aan dat het energie kost om de pseudospin te veranderen van plaats naar plaats. Deze term wil de pseudospin overal gelijkrichten en dus ook de menghoek en de relatieve fase overal gelijk maken. De derde term is de kinetische energie van het condensaat in het roterende assenstelsel. Deze vonden we ook terug voor één component, maar voor twee componenten hebben we een extra term in de definitie van  $\mathbf{v}_{s,eff}$ , nl  $\frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}(\mathbf{r})] \nabla \phi$ . Dit wil zeggen dat zowel gradiënten van de totale fase als gradiënten van de relatieve fase aanleiding kunnen geven tot een snelheidsveld. Later zullen we zien dat dit het verschil bepaalt tussen een vortex en een skyrmion.

De vierde term is de potentiële energie van het condensaat in de val. We hebben hier net als in het geval van één component de centrifugale parabolische potentiaal van het inertiemoment in de potentiaal opgenomen om het kwadraat in de derde term te vervolledigen. Ook hebben we reeds de chemische potentiaal  $\mu$  ingevoerd. De term  $\mu \int d\mathbf{r} \rho_T^2 = \mu N$  met  $N$  het totale aantal deeltjes moeten we mee minimaliseren als we met een constant aantal deeltjes werken (canonisch ensemble).

De vijfde en zesde term vormen samen de interactie energie. De vijfde term is te wijten aan de interatomaire interacties. De paramagnetische term evenredig met  $S_z$  tracht de spins gelijk te richten langs de z-as en zal dus trachten een condensaat te bekomen dat volledig bestaat uit één component. Dit is analoog aan de werking van een magnetisch veld op een magnetisch materiaal. De term evenredig met  $S_z^2$  bepaalt de spin-spin interactie. Als we opnieuw de analogie met een magnetisch materiaal gebruiken, beschrijft  $c_2 > 0$  anti-ferromagnetisme en  $c_2 < 0$  ferromagnetisme. De zesde term is te wijten aan de koppeling tussen de twee condensaten, die de ene component in de andere kan omzetten. Aangezien deze evenredig is met  $S_x$ , zal deze trachten de spins gelijk te richten volgens de x-as, wat wil zeggen dat deze term zal trachten de relatieve fase  $\phi$  zo klein mogelijk te maken.

Als we een condensaat beschouwen waarbij slechts één van de twee componenten aanwezig is ( $\mathbf{S} = \mathbf{e}_z$ ), zien we dat we terug de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal voor een ééncomponentcondensaat (1.38) terugvinden.

$$E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \rho_T|^2 + \frac{m}{2} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 + \rho_T^2 (\tilde{V} - \mu) + g_{11} \frac{\rho_T^4}{2} \right\} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \frac{\hbar}{m} \left\{ \nabla\theta_T + \frac{1}{2} S_z \left( \frac{S_y \nabla S_x - S_x \nabla S_y}{S_x^2 + S_y^2} \right) \right\} = \frac{\hbar}{m} \nabla\theta_T \quad (2.32)$$

### 2.3.4 Keuze van het regime

De uitdrukkingen die we in de vorige secties hebben bekeken, golden telkens in het regime van constante chemische potentiaal  $\mu$  of bij een constant aantal deeltjes. In dat geval kunnen beide componenten in elkaar omgezet worden. De termen in de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal (2.24) die dit tot uitdrukking brengen, worden gegeven door

$$\int d\mathbf{r} \{ -\mu\rho_T^2 - \hbar\omega_R\rho_T^2 S_x \} \quad (2.33)$$

Bij constante chemische potentiaal wordt het aantal deeltjes vastgelegd door de waarde van de chemische potentiaal. In het geval van constant aantal deeltjes wordt de chemische potentiaal bepaald door de voorwaarde dat de toestand waarin de energie minimaal is het juiste aantal deeltjes moet hebben.

Een ander mogelijk regime is het regime waarbij het aantal deeltjes van beide componenten constant wordt gehouden. Hierbij valt de term met de Rabi-frequentie  $\omega_R$  dus weg, maar moeten we twee chemische potentialen invoeren,  $\mu_1$  en  $\mu_2$ . De extra termen in de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal worden dan

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \{ -\mu_1\rho_1^2 - \mu_2\rho_2^2 \} &= - \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \left\{ \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} + \frac{\mu_1 - \mu_2}{2} \cos(\alpha_{mix}) \right\} \\ &= - \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \{ \mu + \zeta \cos(\alpha_{mix}) \} = - \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \{ \mu + \zeta S_z \} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Hierbij hebben we de totale chemische potentiaal  $\mu$  en de relatieve chemische potentiaal  $\zeta$  gedefinieerd als

$$\mu = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} \quad (2.35)$$

$$\zeta = \frac{\mu_1 - \mu_2}{2} \quad (2.36)$$

De totale Gross-Pitaevskii energiefunctonaal in het regime waarbij het aantal deeltjes van beide condensaten constant wordt gehouden, is dus

$$\begin{aligned} E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] &= \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{8m} \rho_T^2 (\nabla\mathbf{S})^2 + \frac{m}{2} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 \right. \\ &\quad \left. + \rho_T^2 (\tilde{V} - \mu) + \frac{\rho_T^4}{2} [c_0 + c_1 S_z + c_2 S_z^2] - \zeta \rho_T^2 S_z \right\} \end{aligned} \quad (2.37)$$

In de verdere berekeningen zullen we steeds veronderstellen dat beide componenten in elkaar omgezet kunnen worden.

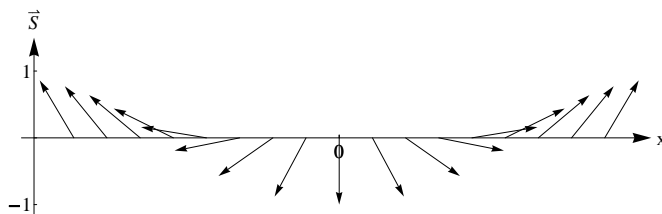
## 2.4 Skyrmionen

Een skyrmion is een topologische excitatie die voor het eerst werd voorgesteld door Tony Skyrme als model voor baryonen [11] (subatomaire deeltjes opgebouwd uit drie quarks, bvb. protonen en neutronen). In termen van (pseudo)spinstructuur, is een skyrmion een object dat gecreëerd kan worden vanuit een grondtoestand waarbij alle (pseudo)spins gelijkgericht zijn, door de (pseudo)spin te inverteren in een eindig gebied in de ruimte. In één dimensie wordt de pseudospin structuur van een skyrmion gegeven door figuur 2.2, in twee dimensies door figuur 2.3. De topologische constante die het skyrmion karakteriseert is het zogenaamde windingsgetal  $Q$  ('winding number').  $Q$  is wiskundig gedefinieerd als

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{r} \epsilon^{ij} \mathbf{S} \cdot \partial_i \mathbf{S} \times \partial_j \mathbf{S} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Sigma} d\mathbf{S} (\nabla \times \mathbf{v}_{eff}) \end{aligned} \quad (2.38)$$

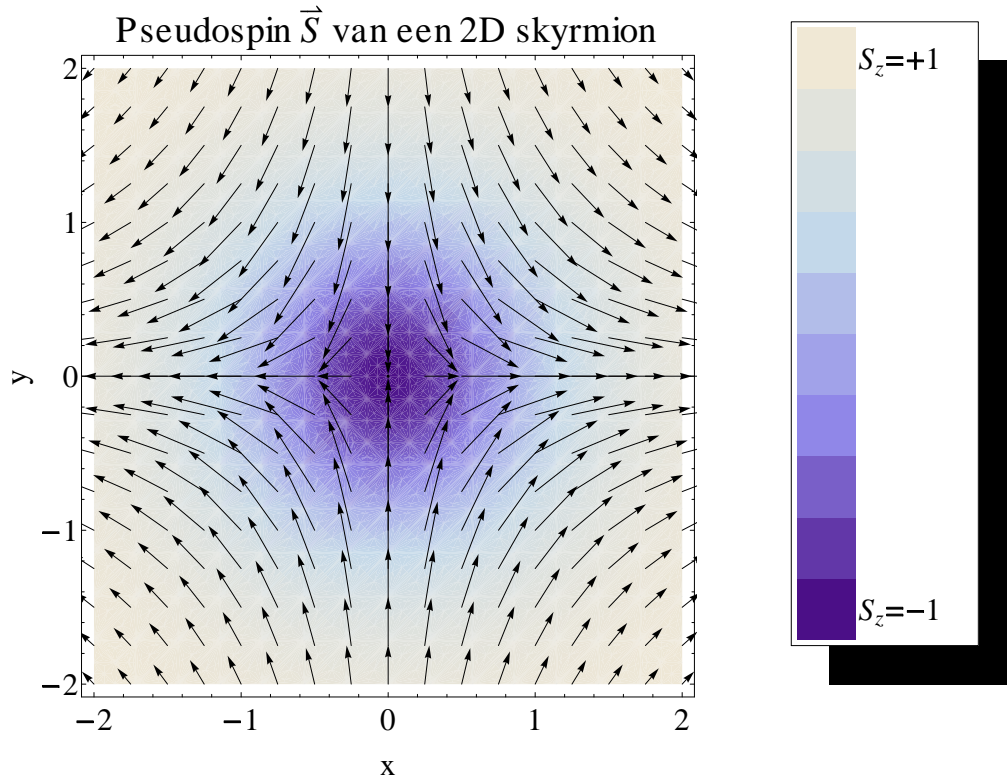
Deze definitie is volledig analoog aan het aantal kwanta van circulatie van een vortex, zoals gedefinieerd in (1.33). Het windingsgetal geeft het aantal keren weer dat de relatieve fase met  $2\pi$  verandert in een gesloten curve rond het skyrmion. Voor een skyrmion is  $Q = \pm 1$ .

Uit de pseudospin structuren die we zonet hebben gedefinieerd voor het skyrmion, kunnen we twee verschillende toestanden van een gemengd Bose-Einstein condensaat construeren. De eerste toestand is gebaseerd op het tweedimensionale skyrmion. Hierbij kiezen we de pseudospin structuur in het  $xy$ -vlak gelijk aan deze van het skyrmion en veronderstellen we dat het condensaat homogeen is in  $z$ -richting. Dit komt overeen met een toestand die beschreven wordt door een vortex in een homogeen condensaat van de eerste component, waarvan de kern opgevuld is met condensaat van de tweede component. We zouden dit een quasi-tweedimensionaal skyrmion kunnen noemen. Bij de tweede toestand is de pseudospin structuur gegeven door de structuur van het driedimensionale skyrmion. In dat geval wordt er een torus gevormd van roterend condensaat van de tweede component. De eerste component roteert zodanig rond deze torus dat het condensaat door de torus heen beweegt, zoals weergegeven in figuur 2.4. Het is dus een vortexlus van de eerste component, waarvan de kern opgevuld is met roterend condensaat van de tweede component. In deze thesis zullen we het quasi-tweedimensionale skyrmion bestuderen. Met het woord 'skyrmion' zullen we verder dus altijd verwijzen naar dit skyrmion.

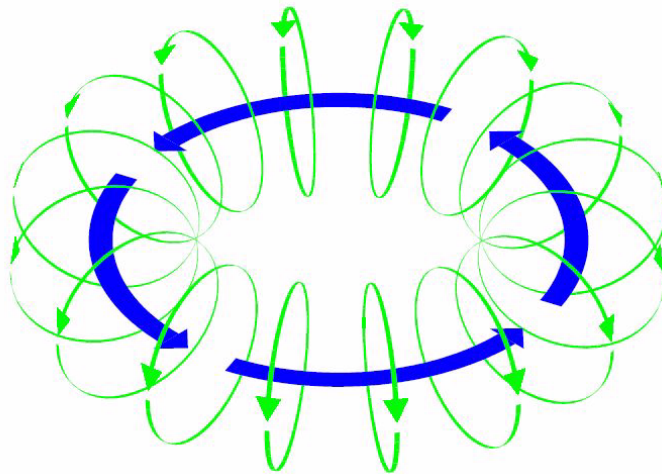


Figuur 2.2: Het pseudospinprofiel van een ééndimensionaal skyrmion. Als we vertrekken vanuit een homogeen condensaat met omhooggerichte spin en de spin in de oorsprong inverteren, zullen de omringende spins trachten zich aan elkaar gelijk te richten. Zo bekomen we bovenstaande spintextuur.

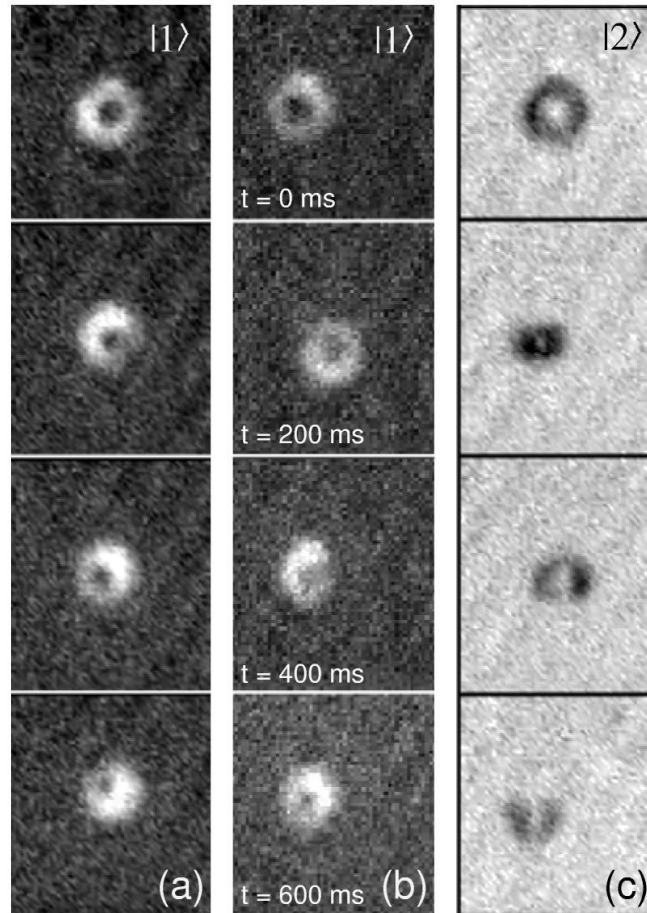
Skyrmionen zijn niet zomaar theoretische structuren. In de context van Bose-Einstein condensatie, werden skyrmionen voor het eerst experimenteel gerealiseerd door Matthews et al. in 1999 [12] (zie figuur 2.5), hoewel dit toen niet als een skyrmion herkend werd: men introduceerde een methode om vortices te creëren gebruik makend van de extra vrijheidsgraden in een tweecomponentscondensaat. Pas in 2002 vond de als zodanig herkende experimentele realisatie van het skyrmion plaats [13]. Verder spelen skyrmionen een cruciale rol in het verklaren van het Quantum-Hall effect in magnetisch systemen [14] en worden ze ook bestudeerd in vloeibaar helium, waar men spreekt van 'Anderson-Toulouse vortices' [15]. Meer achtergrond over vortices, skyrmionen en andere topologische excitaties in Bose-Einstein condensaten met meerdere componenten kan men terugvinden in [16].



Figuur 2.3: Het pseudospinprofiel van een tweedimensionaal skyrmion. De vectoren zijn projecties van de pseudospin  $\mathbf{S}$  op het  $xy$ -vlak. De kleurschakering geeft de grootte van  $S_z$  weer. Als we vertrekken vanuit een homogeen condensaat met omhooggerichte spin en de spin in de oorsprong inverteren, zullen de omringende spins trachten zich aan elkaar gelijk te richten. Zo bekomen we bovenstaande spintextuur.



Figuur 2.4: Het stromingsprofiel van een driedimensionaal skyrmion Bose-Einstein condensaat met twee componenten. [17]



Figuur 2.5: De eerste experimentele realisatie van een skyrmion in een gemengd condensaat van twee hyperfijn toestanden van  $^{87}\text{Rb}$  atomen [12].  $|1\rangle$  correspondeert met de  $|F = 1, m_F = -1\rangle$  toestand en  $|2\rangle$  met de  $|F = 2, m_F = +1\rangle$  toestand. In de linkse en middelste kolom wordt component  $|1\rangle$  gevisualiseerd van een vortex in component  $|1\rangle$ , opgevuld met component  $|2\rangle$ . In de rechtse kolom wordt component  $|2\rangle$  gevisualiseerd van een vortex in component  $|2\rangle$ , opgevuld met component  $|1\rangle$ . De laatste toestand is minder stabiel en vervalst snel.



## Deel II

# Eén topologische excitatie





## Hoofdstuk 3

# Variationele behandeling van één vortex

Om na te gaan welke moeilijkheden optreden bij het gebruik van  $E_{GP}$  voor een variationele behandeling, bekijken we eerst het eenvoudige geval van één enkele vortex in een homogeen, roterend condensaat. We vertrekken vanuit de Gross-Pitaevskii energiefunctiaal en maken de variationele energie dimensieloos, wat noodzakelijk is om de numerieke uitwerking te vereenvoudigen. Vervolgens kiezen we een variationele golffunctie met één parameter. We werken de energiefunctiaal verder uit en we bekijken hoe we de verschillende soorten divergenties in de uitdrukking kunnen wegwerken. Daarna minimaliseren we de overblijvende uitdrukking, om een waarde te bekomen voor onze variationele parameter. Tot slot kunnen we de bekomen waarde van de variationele parameter opnieuw invullen om de energie van een vortex te bekomen.

### 3.1 De energiefunctiaal en de chemische potentiaal

We beschouwen een vortex langs de  $z$ -as in een groot, homogeen condensaat, waarbij de stroomsnelheid constant is langs elke cirkel rond de vortexkern ( $v = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta = \frac{\hbar n_v}{mr}$ ) en de externe potentiaal nul is. Het probleem heeft cilindersymmetrie en we bekijken het dan ook in cilindercoördinaten. Verder beschouwen we een condensaat dat homogeen is in  $z$ -richting, zodat de deeltjesdichtheid  $\rho^2(r, \varphi, z)$  geschreven kan worden als  $\rho^2(r)$ . Om een idee te krijgen hoe  $\rho^2(r)$  er nu juist uitziet, moeten we de totale energie minimaliseren, met als randvoorwaarde dat het aantal deeltjes constant blijft. Deze is gegeven door (1.38).

$$E_{GP}^{vort}[\rho, \theta] = E_{GP}[\rho, \theta] - \mu N \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} &= \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\partial \rho(r)}{\partial r} \mathbf{e}_r \right|^2 + \int d\mathbf{r} \frac{m}{2} \left( n_v \frac{\hbar}{mr} - \Omega r \right)^2 \rho^2(r) \\ &+ \int d\mathbf{r} \left( \tilde{V}(\mathbf{r}) - \mu \right) \rho^2(r) + \int d\mathbf{r} \frac{g}{2} \rho^4(r) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Merk op dat in deze uitdrukking de fasefunctie  $\theta$  volledig vastligt, op de constante  $n_v$  na. We kunnen dus beter  $E_{GP}^{vort}[\rho, n_v]$  schrijven i.p.v.  $E_{GP}^{vort}[\rho, \theta]$ .

De chemische potentiaal bepaalt het aantal deeltjes en omgekeerd bepaalt het totale aantal deeltjes ook de chemische potentiaal. Ver van de vortex is  $\rho$  constant en gelijk aan  $\rho_\infty$ . In eerste benadering is ons condensaat dus een homogeen condensaat met dichtheid  $\rho_\infty^2$ . We kunnen de chemische potentiaal dus benaderen door zijn bulkwaarde. Deze hebben we reeds eerder berekend in deel 1.2.1:  $\mu_{bulk} = g\rho_\infty^2$ . Deze

waarde kunnen we invullen in de energiefunctonaal.

$$E_{GP}^{vort}[\rho, n_v] = \int d\mathbf{r} \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\partial \rho(r)}{\partial r} \mathbf{e}_r \right|^2 + \int d\mathbf{r} \left[ n_v^2 \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \Omega n_v \hbar \right] \rho^2(r) - g \int d\mathbf{r} \left( \rho_\infty^2 - \frac{1}{2} \rho^2(r) \right) \rho^2(r) \quad (3.3)$$

De eerste term is de kwantumdruk, veroorzaakt door de dichtheidsgradiënt. De laatste term is de interactie energie. De tweede term bestaat uit een bijdrage van de kinetische energie en een bijdrage van het draaimoment. Voor grote  $\Omega$  zal deze term een waarde  $n_v \neq 0$  bevoordelen en de condensaatdichtheid in de buurt van de rotatieas ( $r = 0$ ) naar nul willen brengen.

Merk op dat als we de chemische potentiaal benaderen door zijn bulkwaarde, we strikt genomen in het regime van constante chemische potentiaal werken in plaats van bij constant aantal deeltjes. Achteraf zullen we onze benadering testen door onze berekeningen uit te breiden naar een constant aantal deeltjes.

### 3.1.1 Dimensieloos maken

Nu we de energiefunctonaal hebben uitgewerkt, kunnen we deze dimensieloos maken. Deze stap is noodzakelijk om verwarring en fouten met de verschillende constanten  $m$ ,  $\hbar$ , ... in de numerieke berekening te vermijden. We hebben reeds een schaal voor de condensaatdichtheid,  $\rho_\infty^2$  en uit deel 1.2.2 hebben we ook reeds een schaal voor de lengte, de coherentielengte  $\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi\rho_\infty^2 a_s}}$ . In eerste Born benadering hebben we het verband  $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$  tussen  $g$  en de verstrooiingslengte  $a_s$ . Hieruit kunnen we de coherentielengte ook uitdrukken aan de hand van de constanten  $\rho_\infty$ ,  $g$ ,  $\hbar$  en  $m$  die ook in de uitdrukking van de totale energie voorkomen.

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mg\rho_\infty^2}} \quad (3.4)$$

We maken de uitdrukking nu reeds gedeeltelijk dimensieloos via

$$f(r) = \frac{\rho(r)}{\rho_\infty} \quad (3.5)$$

$$\tilde{r} = \frac{r}{\xi} \quad (3.6)$$

Hierbij kunnen we de integratie over  $\mathbf{r}$  schrijven als

$$\int d\mathbf{r} = \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^L dz \quad (3.7)$$

Het condensaat is homogeen in  $z$ -richting, zodat we de integratiegrenzen over  $z$  vrij kunnen kiezen. De integraal over  $z$  is gelijk aan de totale hoogte  $L$  van het condensaat. Als we de energie van het condensaat per lopende meter in  $z$ -richting willen berekenen, moeten we  $L = 1$  m stellen.

$$E_{GP}^{vort}[f, n_v] = 2\pi\rho_\infty^2 \frac{\hbar^2}{2m} L \int_0^{\tilde{R}} \tilde{r} d\tilde{r} \left| \frac{\partial f(r)}{\partial \tilde{r}} \right|^2 + 2\pi \frac{\hbar^2}{2m} \rho_\infty^2 L \int_0^{\tilde{R}} \tilde{r} d\tilde{r} \left[ \frac{n_v^2}{\tilde{r}^2} - \frac{2m\xi^2}{\hbar} \Omega n_v \right] f(r)^2 - 2\pi \frac{\hbar^2}{2m} \rho_\infty^2 L \int_0^{\tilde{R}} \tilde{r} d\tilde{r} \left( 1 - \frac{1}{2} f(r)^2 \right) f(r)^2 \quad (3.8)$$

Uit de overblijvende constanten in de uitdrukking, vinden we een natuurlijke frequentieschaal

$$\Omega_0 = \frac{\hbar}{2m\xi^2} = \frac{g\rho_\infty^2}{\hbar} = \frac{\mu}{\hbar} \quad (3.9)$$

en een natuurlijke energieschaal

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \rho_\infty^2 L = \mu \rho_\infty^2 \xi^2 L \quad (3.10)$$

Als we hiermee de totale energie verder volledig dimensieloos maken via  $\tilde{E} = \frac{E}{\varepsilon}$  en  $\tilde{\Omega} = \frac{\Omega}{\Omega_0}$  en de tildes terug weglaten, bekomen we

$$E_{GP}^{vort} [f, n_v] = 2\pi \int_0^R r dr \left[ \left| \frac{\partial f}{\partial r} \right|^2 + \left( \frac{n_v^2}{r^2} - \Omega n_v \right) f^2 - \left( 1 - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 \right] \quad (3.11)$$

Dit kunnen we verder nog schrijven als

$$E_{GP}^{vort} = 2\pi \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{rot} \} \quad (3.12)$$

met

$$\mathcal{E}_{qp} = \left| \frac{\partial f}{\partial r} \right|^2 \quad (3.13)$$

de bijdrage van de kwantumdruk (qp = quantum pressure),

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{n_v^2}{r^2} f^2 \quad (3.14)$$

de kinetische energie,

$$\mathcal{E}_{int} = - \left( 1 - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 = \frac{(1 - f^2)^2}{2} - \frac{1}{2} \quad (3.15)$$

de interactie energie en

$$\mathcal{E}_{rot} = -\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{L} = -\Omega n_v f^2 \quad (3.16)$$

de rotatie energie. Deze opsplitsing zal later de vergelijking met een skyrmion vereenvoudigen.

## 3.2 Probeer-golffunctie

We kunnen nu een probeer-golffunctie voor  $f(r)$  kiezen. De twee belangrijkste eisen die we moeten opleggen is dat  $f$  nul moet zijn voor  $r \rightarrow 0$  en naar 1 moet gaan voor  $r \rightarrow \infty$ . Er zijn heel veel functies die aan deze eisen voldoen. Naar analogie van het condensaat aan een wand (zie 1.2.2, waarbij we de vortexkern als de wand beschouwen), kiezen we volgende probeer-golffunctie.

$$f(r) = \tanh(\alpha r) \quad (3.17)$$

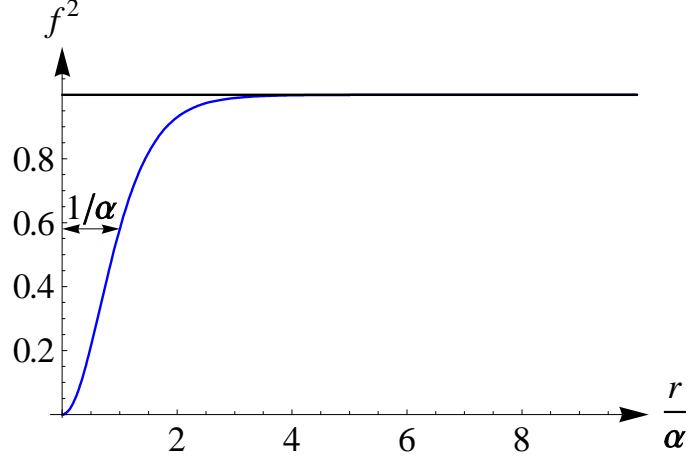
De variationele parameter  $\alpha$  is een uitdrukking voor de grootte van de vortexkern. Hoe groter  $\alpha$ , hoe kleiner de vortexkern (zie figuur 3.1). Andere mogelijke functies zijn bvb.

$$f(r) = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ 1 & r < r_0 \end{cases} \quad (3.18)$$

$$f(r) = \frac{r}{r+b} \quad (3.19)$$

$$f(r) = 1 - \exp(-\beta r) \quad (3.20)$$

Van deze drie voorbeelden benadert de eerste het slechtst en de laatste het best het werkelijke profiel. Hoewel het slechts een ruwe benadering is, geeft zelfs de eerste voorbeeldfunctie (de stapfunctie) goede kwalitatieve voorspellingen. We kunnen nu de verschillende termen uit (3.12) berekenen. We beginnen met de bijdrage



Figuur 3.1: Voorgestelde dichtheidsprofiel van een vortex. De breedte van de vortex is evenredig met  $\frac{1}{\alpha}$ .

van de kwantumdruk.

$$\mathcal{E}_{qp}^{vort} = \left| \frac{\partial f}{\partial r} \right|^2 = \frac{\alpha^2}{\cosh^4(\alpha r)} \quad (3.21)$$

Vervolgens berekenen we de kinetische energie

$$\mathcal{E}_{kin}^{vort} = \frac{n_v^2}{r^2} f^2 = n_v^2 \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2} \quad (3.22)$$

en de interactie energie

$$\mathcal{E}_{int}^{vort} = - \left( 1 - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 = \frac{(1 - f^2)^2}{2} - \frac{1}{2} \quad (3.23)$$

$$= \frac{1}{2 \cosh^4(\alpha r)} - \frac{1}{2} \quad (3.24)$$

Tenslotte berekenen we de bijdrage van het draaimoment.

$$\mathcal{E}_{rot}^{vort} = -\Omega n_v f^2 = -\Omega n_v \tanh^2(\alpha r) \quad (3.25)$$

De totale energie van een vortex is dus gegeven door

$$E_{GP}^{vort}[\alpha, n_v] = 2\pi \int_0^R r dr \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^4(\alpha r)} + n_v^2 \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2} + \frac{1}{2 \cosh^4(\alpha r)} - \frac{1}{2} - \Omega n_v \tanh^2(\alpha r) \right\} \quad (3.26)$$

### 3.3 Omgaan met oneindigheden

In de vorige paragraaf hebben we een dimensieloze uitdrukking voor de energie gevonden. Deze kunnen we echter nog niet zomaar minimaliseren. We hebben een heel grote bijdrage voor grote  $R$ : voor  $R \rightarrow \infty$  hebben we hier een oneindig condensaat, dat sowieso een oneindige hoeveelheid energie zal hebben (aangezien we  $\mu$  aan energie moeten betalen per deeltje) en een oneindige bijdrage van het draaimoment. Om oneindigheden weg te werken, volstaat het om een 'constante' functie met dezelfde  $R$ -afhankelijkheid voor grote  $R$  van de energie af te trekken. Met constante functie bedoelen we hier een functie die niet meer afhangt van de variationele parameters. Dit is toegelaten, aangezien enkel energiever schillen een echte fysische betekenis hebben. Een andere methode om oneindigheden weg te werken is het afzonderen van een divergente term

die niet meer afhangt van de variationele parameters. Beide methoden zijn equivalent, hoewel de praktische uitwerking verschilt.

Als eerste trekken we de energie van een homogeen condensaat zonder vortex ( $n_v = 0$ ) van de totale energie af. Deze energie is gegeven door

$$E_0 = 2\pi \int_0^R r dr \left( -\frac{1}{2} \right) = -\frac{\pi R^2}{2} \quad (3.27)$$

Het verschil van (3.26) en (3.27) wordt gegeven door

$$\begin{aligned} E_{tot}^{vort}[\alpha, n_v] &= E_{GP}^{vort}[\alpha, n_v] - E_0 \\ &= 2\pi \int_0^R r dr \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^4(\alpha r)} + n_v^2 \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2} + \frac{1}{2} \frac{1}{\cosh^4(\alpha r)} - \Omega n_v \tanh^2(\alpha r) \right\} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Om de integralen verder te kunnen uitwerken, veranderen we van variabele:  $x = \alpha r$ .

$$E_{tot}^{vort} = 2\pi \int_0^{\alpha R} x dx \left\{ \frac{1}{\cosh^4(x)} + n_v^2 \frac{\tanh^2(x)}{x^2} + \frac{1}{2\alpha^2} \frac{1}{\cosh^4(x)} - \frac{\Omega n_v}{\alpha^2} \tanh^2(x) \right\} \quad (3.29)$$

De eerste en de derde term convergeren. Voor grote  $R$  ( $R \rightarrow +\infty$ ) geldt dus

$$E_{qp}^{vort} \approx 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{1}{\cosh^4(x)} \right\} = 2\pi \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) \quad (3.30)$$

$$E_{int}^{vort} \approx 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{1}{2\alpha^2} \frac{1}{\cosh^4(x)} \right\} = \frac{2\pi}{2\alpha^2} \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) \quad (3.31)$$

De integraal van de tweede en de vierde term bevatten nog divergenties. Deze zullen we apart bekijken. We beginnen met het afzonderen van de logaritmische divergentie in de tweede term, de kinetische energie.

$$\begin{aligned} E_{kin}^{vort} &= 2\pi n_v^2 \int_0^{\alpha R} x dx \frac{\tanh^2(x)}{x^2} \\ &= 2\pi n_v^2 \left[ \int_0^1 dx \frac{\tanh^2(x)}{x} + \int_1^{\alpha R} dx \frac{\tanh^2(x) - 1}{x} + \int_1^{\alpha R} dx \frac{1}{x} \right] \\ &= 2\pi n_v^2 \left[ \int_0^1 dx \frac{\tanh^2(x)}{x} - \int_1^{\alpha R} dx \frac{1}{x \cosh^2(x)} + \ln \alpha + \ln R \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

De overblijvende integralen convergeren voor  $R \rightarrow +\infty$ , al moeten we deze wel numeriek uitwerken. Dit hebben we gedaan in Mathematica. Het resultaat voor grote  $R$  wordt gegeven door

$$E_{kin}^{vort} \approx 2\pi n_v^2 [0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R] \quad (3.33)$$

We zien dat de divergentie mooi afgezonderd is in een aparte term,  $\ln R$ . De andere termen blijven eindig en hangen niet meer af van  $R$  voor  $R \rightarrow +\infty$ .

De laatste term die we nog moeten bekijken is de rotatie energie.

$$E_{rot}^{vort} = -2\pi \frac{\Omega n_v}{\alpha^2} \int_0^{\alpha R} x dx \tanh^2(x) \quad (3.34)$$

De overblijvende integraal is volledig analytisch uitwerkbaar.

$$E_{rot}^{vort} = -2\pi \frac{\Omega n_v}{\alpha^2} \left[ \frac{(\alpha R)^2}{2} + \ln [\cosh(\alpha R) - (\alpha R) \tanh(\alpha R)] \right] \quad (3.35)$$

Voor grote  $R$  is dit benaderend gelijk aan

$$E_{rot} \approx -2\pi \Omega n_v \left[ \frac{R^2}{2} - \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right] \quad (3.36)$$

De dominante term in  $E_{rot}$  is duidelijk evenredig met  $R^2$ . Deze term divergeert voor  $R \rightarrow +\infty$ , maar hangt duidelijk niet meer af van de variationele parameter en heeft dus geen invloed op de waarde van  $\alpha$ . De tweede term is veel kleiner dan de eerste, maar aangezien deze nog afhangt van  $\alpha$  kunnen we deze toch niet verwaarlozen ten opzichte van de eerste term. Merk op dat de volledige uitdrukking evenredig is met  $\Omega$  en met  $n_v$ .

Alles samen hebben we drie positieve en één negatieve term. De positieve termen geven de energiekost weer van een vortex. De negatieve term is de energiewinst.

$$\frac{E_{kost}^{vort}}{2\pi} = \frac{E_{qp}^{vort} + E_{kin}^{vort} + E_{int}^{vort}}{2\pi} = \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) \left( 1 + \frac{1}{2\alpha^2} \right) + n_v^2 [0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R] \quad (3.37)$$

$$\frac{E_{winst}^{vort}}{2\pi} = -\frac{E_{rot}^{vort}}{2\pi} = \Omega n_v \left[ \frac{R^2}{2} - \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right] \quad (3.38)$$

$$\frac{E_{tot}^{vort}[\alpha, n_v]}{2\pi} = \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) \left( 1 + \frac{1}{2\alpha^2} \right) + n_v^2 [0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R] - \Omega n_v \left[ \frac{R^2}{2} - \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right] \quad (3.39)$$

In figuur 3.2 hebben we de verschillende bijdragen tot de energie geplot in functie van  $\alpha$  voor  $\Omega = 1$ , zonder rekening te houden met de termen die enkel nog afhangen van  $R$ . Er is duidelijk sprake van een energieminimum, bepaald door de balans tussen de interactie energie, de kinetische energie en de rotatie energie. De interactie energie en de rotatie energie bevoordelen een grote waarde van  $\alpha$  en dus een kleine vortex. De reden hiervoor is dat het (interactie)energie kost om meer condensaat te vernietigen in de vortexkern. Verder is het voor de rotatie energie voordeliger om meer condensaat te laten meedraaien. De kinetische energie bevoordeelt een kleine waarde van  $\alpha$  en dus een grote vortexgrootte, aangezien er dan minder condensaat is dat kan bijdragen tot de kinetische energie. In de volgende sectie zullen we de waarde van  $\alpha$  in dit energieminimum berekenen.

### 3.4 Minimalisatie van de energie

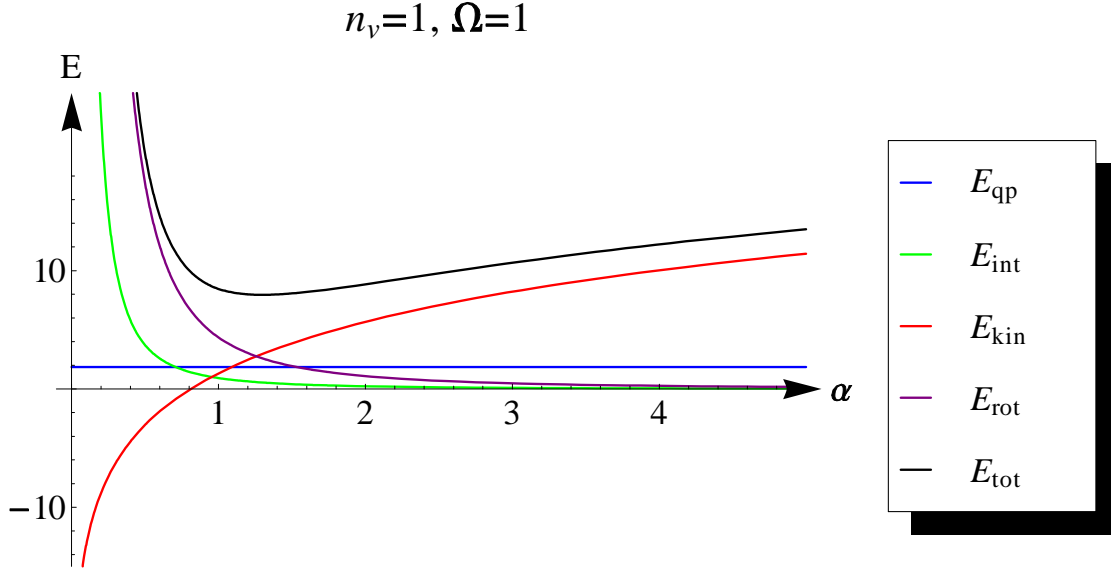
De optimale waarde  $\alpha_{vort}$  voor  $\alpha$  is de waarde waarvoor de energie minimaal is. Nu we in (3.39) een uitdrukking hebben voor de energie, kunnen we deze minimaliseren. Hiervoor stellen we de afgeleide van (3.39) gelijk aan nul.

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{E_{tot}^{vort}[\alpha, n_v]}{2\pi} \right) \\ &= -2 \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{12} + \Omega n_v \ln 2 \right) \frac{1}{\alpha^3} + n_v^2 \frac{1}{\alpha} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\Leftrightarrow \alpha_{vort} = +\infty \text{ of } \alpha_{vort} = \sqrt{\frac{1}{n_v^2} \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + \Omega n_v 2 \ln 2 \right)} \quad (3.41)$$

Het geval  $\alpha = +\infty$  komt overeen met een homogeen condensaat en is geen geldige vortexoplossing. Het andere geval is wel een geldige vortexoplossing, op voorwaarde dat  $n_v \neq 0$ . In het geval van één circulatiekwantum ( $n_v = 1$ ) wordt dit

$$\alpha_{vort}(n_v = 1) = \sqrt{\left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + \Omega 2 \ln 2 \right)} \quad (3.42)$$



Figuur 3.2: De verschillende bijdragen tot de energie in functie van de variationele parameter  $\alpha$  voor  $\Omega = 1$  en  $n_v = 1$ . De termen die afhangen van  $R$  werden hier niet meegerekend, aangezien deze niet afhangen van  $\alpha$  en op deze wijze de  $\alpha$ -afhankelijkheid beter zichtbaar is. Er is duidelijk sprake van een energieminimum, bepaald door de balans tussen de interactie energie  $E_{int}$ , de kinetische energie  $E_{kin}$  en de bijdrage van het draaimoment  $E_{rot}$ .

Dit is verschillend van de waarde  $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.7071 \dots$  die we bij een harde wand vonden, zelfs bij  $\Omega = 0$ . We kunnen nu (3.41) invullen in (3.39).

$$\frac{E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort}, n_v]}{2\pi} = \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) - \Omega n_v \frac{R^2}{2} + n_v^2 [0.709505 \dots + \ln(\alpha_{vort}) - \ln(n_v) + \ln R] \quad (3.43)$$

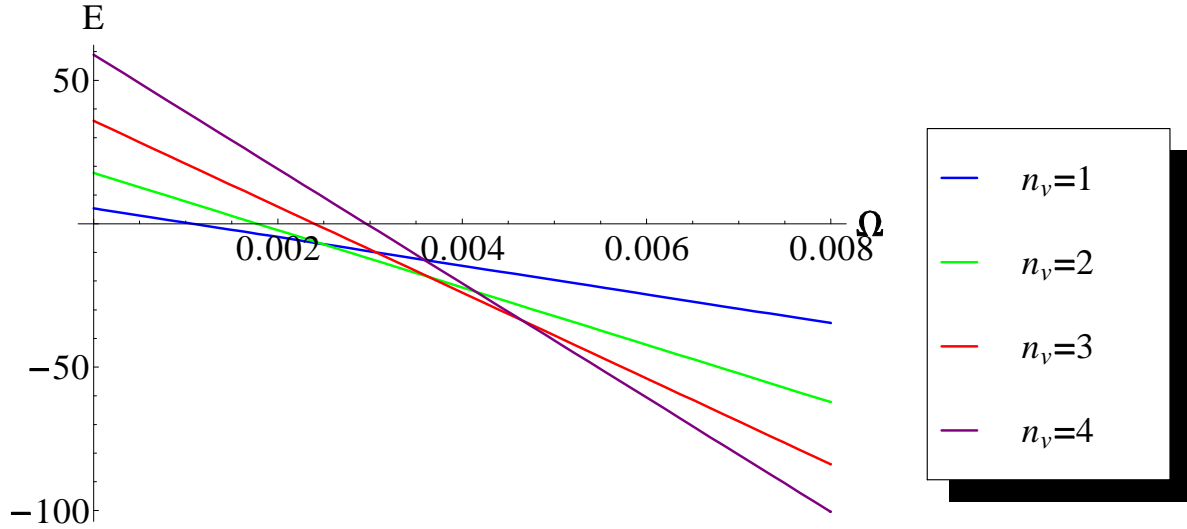
Opdat een vortex energetisch voordeliger zou zijn dan een homogeen condensaat zonder vortex, moet dit energieminimum groter zijn dan 0, oftewel  $E_{kost}^{vort} < E_{winst}^{vort}$ . Hoe groter  $\Omega$ , hoe groter de energiewinst. We zoeken nu de kritische waarde  $\Omega_{crit}$  waarbij het energetisch voordelig wordt om een vortex te vormen. Bij  $\Omega_{crit}$  geldt  $E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort}, n_v] = 0$ . In een groot condensaat zijn de termen van  $E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort}, n_v]$  die nog afhankelijk zijn van  $R$  dominant. De andere termen zijn verwaarloosbaar klein (in de berekening van de waarde van de energie, maar natuurlijk niet in de bepaling van  $\alpha_{vort}$ ). De voorwaarde  $E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort}, n_v] = 0$  herleidt zich dan bij benadering tot

$$n_v^2 \ln R = \Omega_{crit} n_v \frac{R^2}{2} \quad (3.44)$$

$$\Leftrightarrow \Omega_{crit} = \frac{n_v \ln(R^2)}{R^2} \quad (3.45)$$

We zien dus duidelijk dat als we een homogeen condensaat roteren, er een kritische rotatiefrequentie bestaat. Boven deze kritische rotatiefrequentie zal het energetisch voordeliger zijn om een vortex te vormen. De kritische rotatiefrequentie hangt vooral af van de grootte van het 'vat', oftewel de val waarin het zich bevindt. Hoe groter de straal van de val, hoe kleiner de kritische rotatiefrequentie. Dit wordt veroorzaakt door het feit dat de energiewinst van het draaimoment sterker afhangt van  $R$  dan het energieverlies van de kinetische energie.

Voor toenemende  $\Omega$ , zien we in figuur 3.3 dat vortices met een steeds hoger aantal kwanta van circulatie energetisch voordeliger worden. Er is echter nog een ander scenario denkbaar: het vormen van verschillende vortices met een lager aantal circulatiekwanta. Wat is energetisch het voordeligste?



Figuur 3.3: De energie van één vortex in functie van  $\Omega$  voor verschillende kwanta van circulatie bij  $R = 100$ . Hoe groter  $\Omega$ , hoe groter het aantal kwanta van circulatie waarbij de energie minimaal is.

In het geval van twee vortices, zullen de snelheidsvelden van beide vortices met elkaar interageren, wat de snelheid verlaagt tussen de twee vortices in. Dit verlaagt de kinetische energie, wat ervoor zorgt dat het energetisch voordeliger is om meerdere vortices te vormen. Hoe verder de vortices van elkaar verwijderd zijn, hoe groter het gebied waarin de energie verlaagd wordt. Dit zorgt ervoor dat vortices elkaar afstoten en dat twee vortices met één circulatiekwanta energetisch voordeliger zijn dan één vortex met twee circulatiekwanta. Dit wordt verder in detail afgeleid in hoofdstuk 7, waar we de interactie tussen twee vortices bekijken.

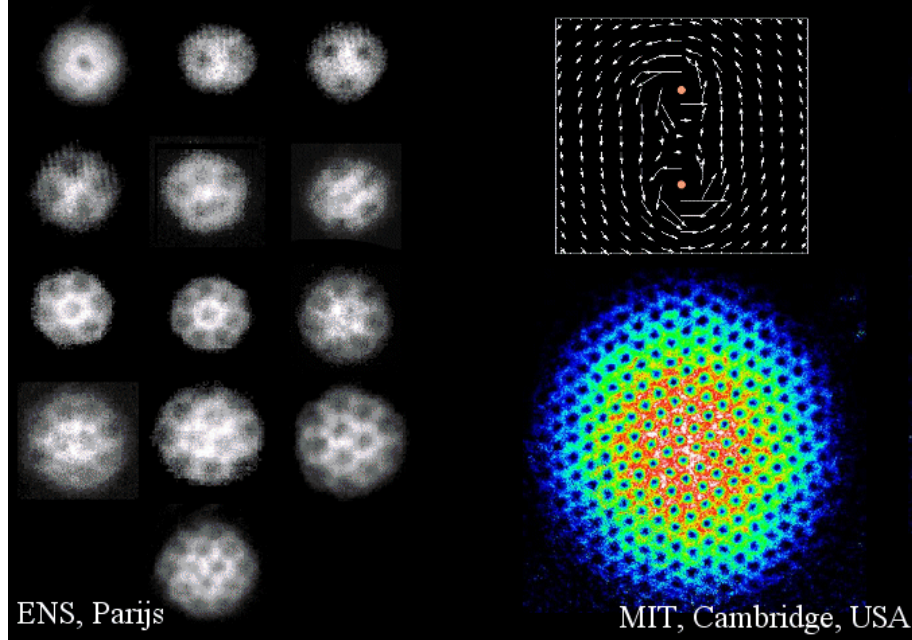
Als de snelheid verder toeneemt blijft het altijd energetisch voordeliger om meerdere vortices te vormen dan om een vortex met meerdere circulatiekwanta te vormen. De vortices stoten elkaar af, wat ervoor zorgt dat er een 'Abrikosov rooster' gevormd wordt als er meerdere vortices in hetzelfde condensaat aanwezig zijn. Het Abrikosov rooster is de configuratie die de afstand tussen de vortices maximaliseert. Dit is ook wat men experimenteel waarneemt, zoals weergegeven in figuur 3.4. Aangezien er in de praktijk enkel vortices met één circulatiekwantum gevormd worden, zullen we verder enkel nog vortices met  $n_v = 1$  beschouwen.

### 3.5 Overgang van constante chemische potentiaal naar constant aantal deeltjes

Bij de voorgaande berekeningen werkten we in het regime van constante chemische potentiaal. Bij de latere vergelijking met skyrmionen, is het echter belangrijk om in het regime van constant aantal deeltjes te werken. Als we dit niet doen, is het mogelijk dat de energiever verschillen die we vinden enkel te wijten zijn aan het verschillende aantal deeltjes. Om in het regime van een constant aantal deeltjes te werken, moeten we in het canonisch ensemble werken. Eerder hebben we in het grootcanonisch ensemble gewerkt. Om van het grootcanonisch ensemble over te gaan naar het canonisch ensemble, moeten we een term  $\mu N$  bij de energie bijtellen. Dit houdt in de praktijk in dat we de term  $-\mu f^2$  in  $\mathcal{E}_{int}$  moeten weglaten. Verder leggen we het aantal deeltjes vast in de keuze van onze dichtheid  $\rho_0^2$  in onze probeergolffunctie. Als eenheid voor de dichtheid kiezen we de dichtheid  $\rho_\infty^2$  van een homogeen condensaat met dezelfde omvang en hetzelfde aantal deeltjes. Zo gebruiken we altijd dezelfde eenheden, wat vergelijking tussen verschillende uitdrukkingen vereenvoudigt. Een goede keuze voor de probeergolffunctie is dan

$$f(r) = \frac{\rho_0}{\rho_\infty} \tanh(\alpha r).$$





Figuur 3.4: Bij toenemende rotatiesnelheid worden er steeds meer vortices gevormd. De vortices stoten elkaar af, waardoor er bij hogere rotatiesnelheden een rooster van vortices ontstaat: het 'Abrikosov rooster'. [18] [19]

Dit profiel wordt weergegeven in figuur 3.5. De voorwaarde dat ons condensaat met één vortex nog altijd hetzelfde aantal deeltjes moet bevatten als een homogeen condensaat met dichtheid  $\rho_\infty$  geeft ons volgende voorwaarde voor een cilindrisch condensaat met straal  $R$ :

$$\rho_\infty^2 \int_0^R r dr = \rho_0^2 \int_0^R \tanh(\alpha r) r dr \quad (3.46)$$

Hierbij hebben we telkens de dichtheid vermenigvuldigd met de uitdrukking voor het volume van het condensaat (in het linkerlid voor een homogeen condensaat, in het rechterlid voor een homogeen condensaat met vortex). We werken deze voorwaarde verder uit om een uitdrukking te vinden voor  $\left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty}\right)^2 \cdot \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty}\right)^2$  noemen we verder  $F(\alpha R)$ .

$$F(\alpha R) = \left(\frac{\rho_0}{\rho_\infty}\right)^2 = \left[1 + \frac{2}{(\alpha R)^2} \ln[\cosh(\alpha R)] - \frac{2}{\alpha R} \tanh(\alpha R)\right]^{-1} \quad (3.47)$$

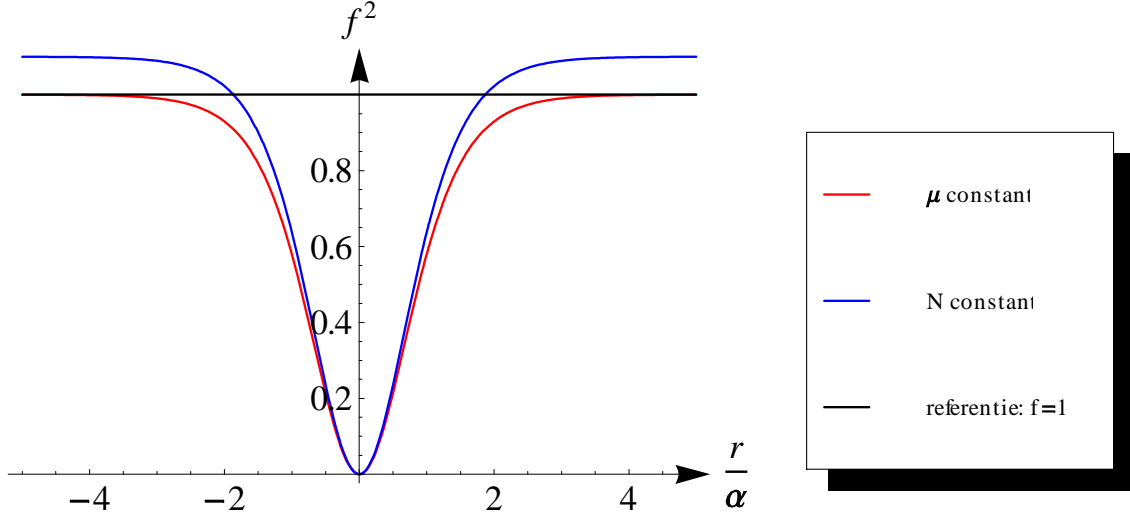
$F(\alpha R)$  gaat naar 1 in de limiet van een oneindig groot condensaat. We kunnen deze nu gebruiken om de  $f$  te herschrijven.

$$f(r) = \frac{\rho_0}{\rho_\infty} \tanh(\alpha r) = \sqrt{F(\alpha R)} \tanh(\alpha r) \quad (3.48)$$

De extra factor  $\sqrt{F(\alpha R)}$  in onze uitdrukking voor  $f$ , zal ook onze uitdrukking voor de kwantumdruk, de interactie energie, de kinetische energie en de rotatie energie in (3.12) veranderen.

$$\mathcal{E}_{qp} = \left|\frac{\partial f}{\partial r}\right|^2 = F(\alpha R) \frac{\alpha^2}{\cosh^4(\alpha r)} \quad (3.49)$$

$$\mathcal{E}_{kin} = \frac{n_v^2}{r^2} f^2 = \frac{F(\alpha R) \tanh^2(\alpha r)}{r^2} \quad (3.50)$$



Figuur 3.5: Het herschaalde profiel van een vortex bij constant aantal deeltjes, vergeleken met het profiel bij constante chemische potentiaal.

$$\mathcal{E}_{int} = \frac{1}{2}f^4 = \frac{1}{2}F(\alpha R)^2 \tanh^4(\alpha r) \quad (3.51)$$

$$\mathcal{E}_{rot} = -\Omega n_v f^2 = -\Omega F(\alpha R) \tanh^2(\alpha r) \quad (3.52)$$

We hebben hier reeds  $n_v = 1$  gesteld en de term  $-\mu f^2$  uit  $\mathcal{E}_{int}$  weggelaten (we werken in het canonisch ensemble). We kunnen nu alle termen samenvoegen tot een volledige gehernormaliseerde energiefunctiaal van een vortex.

$$E_N^{vort} = 2\pi F(\alpha R) \int_0^{\alpha R} x dx \left\{ \frac{1}{\cosh^4 x} + \frac{\tanh^2 x}{x^2} + \frac{1}{2\alpha^2} F(\alpha R) \tanh^4 x - \frac{\Omega}{\alpha^2} \tanh^2 x \right\} \quad (3.53)$$

Het subscript  $N$  gebruiken we om aan te duiden dat we hier bij constant aantal deeltjes  $N$  werken.  $F(\alpha R)$  hangt niet af van de integratievariabele  $x$  en kunnen we dus buiten de integratie brengen. De overblijvende integralen werden reeds uitgewerkt voor grote  $R$  ( $R \rightarrow +\infty$ ) in onze voorgaande berekening bij constante chemische potentiaal in deel 3.3. De oplossingen kunnen we terug invullen in (3.53).

$$\begin{aligned} \frac{E_N^{vort}}{2\pi} &= F(\alpha R) \left[ \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) + 0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R \right] \\ &+ \frac{F^2(\alpha R)}{2} \left( \frac{R^2}{2} - \frac{1}{\alpha^2} \frac{8 \ln 2 + 1}{6} \right) - \Omega \frac{R^2}{2} \end{aligned} \quad (3.54)$$

We kunnen nu opnieuw de optimale waarde van  $\alpha$  berekenen. Dit hebben we numeriek gedaan in Mathematica. Het resultaat voor  $R = 1000$  wordt weergegeven in figuur 3.6 als functie van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Hierbij zien we dat bij een constant aantal deeltjes  $\alpha_{vort}$  niet meer afhangt van  $\Omega$ . Voor voldoende grote  $R$  ( $R > 100$ ) is de waarde van  $\alpha_{vort,N}$  gegeven door de waarde in het regime van constante chemische potentiaal bij  $\Omega = 0$ ,

$$\alpha_{vort,N} = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}} \quad (3.55)$$

Bij constante chemische potentiaal hangt  $\alpha_{vort}$  wel af van  $\Omega$ . De oorzaak van dit verschil is het feit dat het draaimoment per deeltje constant is voor een vortex in een homogeen condensaat, zoals we eerder berekenden in 1.3.1. Zolang het aantal deeltjes niet verandert, blijft de rotatie energie  $\mathcal{E}_{rot} = -\Omega \cdot \mathbf{L}$  dus onafhankelijk van de variationele parameter  $\alpha$ , zodat  $\alpha_{vort}$  niet afhangt van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Bij constante chemische

potentiaal moeten we deeltjes vernietigen om de vortex groter te maken en deeltjes creëren om de vortex kleiner te maken. Als het aantal deeltjes verandert, verandert het draaimoment. De rotatie energie is bij constante chemische potentiaal dus wel afhankelijk van de variationele parameter  $\alpha$ , zodat  $\alpha_{vort}$  in dat geval wél afhankelijk zal zijn van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Algemeen is  $\alpha_{vort}$  even groot of groter bij constante chemische potentiaal, zodat in dat geval de vortex kleiner zal zijn. Dit verkleint de extra energiekost die we moeten betalen om het condensaat te vernietigen.

We kunnen de optimale waarde van  $\alpha$  ook exact berekenen door te vertrekken van de waarde van  $\alpha_{vort,\mu}$  en te kijken naar de herschaling van de eenheden. Als we het profiel van een vortex in beide regimes herschalen, zouden we bij  $\Omega = 0$  exact hetzelfde profiel moeten terugvinden. Voor een vortex bij constante chemische potentiaal is dit gegeven door

$$\rho_\mu = \rho_\infty \tanh \left[ \frac{r}{\xi \alpha_{vort,\mu}} \right] = \rho_\infty \tanh \left[ \frac{\sqrt{8\pi\rho_\infty^2 a_s}}{\alpha_{vort,\mu}} r \right] \quad (3.56)$$

waarbij we de definitie (1.19) van de coherentielengte hebben gebruikt. Herschaald naar de eenheden bij constant aantal deeltjes, levert dit

$$\rho_N = \rho_0 \tanh \left[ \frac{\sqrt{8\pi\rho_0^2 a_s}}{\alpha_{vort,\mu}} r \right] \quad (3.57)$$

Herschrijven naar de eenheden bij constante chemische potentiaal levert

$$\rho_N = \left( \frac{\rho_0}{\rho_\infty} \right) \rho_\infty \tanh \left[ \left( \frac{\rho_0}{\rho_\infty} \right) \frac{\sqrt{8\pi\rho_\infty^2 a_s}}{\alpha_{vort,\mu}} r \right] = \sqrt{F(\alpha R)} \rho_\infty \tanh \left[ \frac{\sqrt{F(\alpha R)} r}{\alpha_{vort,\mu} \xi} \right] \quad (3.58)$$

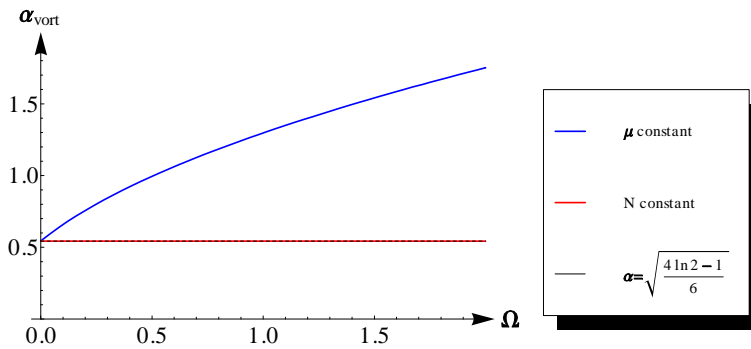
Als we dit terug in de vorm

$$\rho_N = \sqrt{F(\alpha R)} \rho_\infty \tanh \left[ \frac{r}{\xi \alpha_{vort,N}} \right] \quad (3.59)$$

willen brengen, vinden we

$$\alpha_{vort,N} = \frac{\alpha_{vort,\mu}}{\sqrt{F(\alpha R)}} = \frac{1}{\sqrt{F(\alpha R)}} \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}} \quad (3.60)$$

Dit is de exacte waarde van  $\alpha_{vort,N}$ . Voor grote  $R$  kunnen we echter  $F(\alpha R) = 1$  stellen, zodat  $\alpha_{vort,N} = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}}$ .



Figuur 3.6: De waarde  $\alpha_{vort}$  van de variationele parameter  $\alpha$  in het energieminimum als functie van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Bij constant aantal deeltjes hangt  $\alpha_{vort}$  niet af van  $\Omega$ , terwijl dit wel het geval is bij constante chemische potentiaal. Als referentie werd de constante functie  $\alpha = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}}$  eveneens weergegeven.

We zien dat bij constant aantal deeltjes  $\alpha_{vort} = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}}$ .

Nu we de waarde  $\alpha_{vort}$  van de variationele parameter  $\alpha$  hebben bestudeerd, kunnen we ook de waarde van de energie voor beide regimes vergelijken. Daarvoor moeten we eerst de energie bij constante chemische potentiaal omschrijven naar het canonisch ensemble. Daarvoor moeten we een term  $\mu N$  met  $\mu = 1$  bij de totale energie  $E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort}, n_v = 1]$  bijtellen. Voor het profiel van de vortex uit (3.17) wordt deze term gegeven door

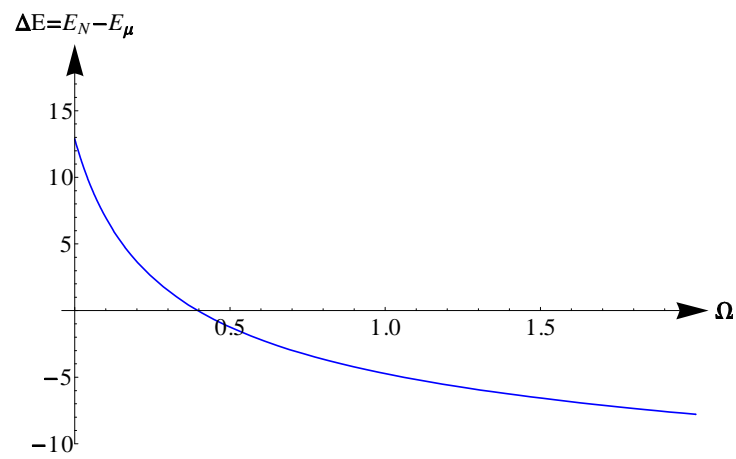
$$\begin{aligned}\mu N &= 2\pi \int_0^R \tanh^2(\alpha r) r dr \\ &= \frac{2\pi}{\alpha^2} \left\{ \frac{\alpha^2 R^2}{2} + \ln[\cosh(\alpha R)] - \alpha R \tanh(\alpha R) \right\} \\ &\approx 2\pi \left[ \frac{R^2}{2} - \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right]\end{aligned}\tag{3.61}$$

$E_{tot}^{vort}[\alpha_{vort,\mu}, n_v = 1] = E_{GP}^{vort}[\alpha_{vort,\mu}, n_v = 1] - E_0$  wordt gegeven door (3.43). De totale energie  $E_{\mu}^{vort}$  van een vortex bij constante chemische potentiaal in het canonisch ensemble gegeven is dus gegeven door

$$\begin{aligned}\frac{E_{\mu}^{vort}}{2\pi} &= \frac{E_{GP}^{vort} + \mu N}{2\pi} = \frac{E_{tot}^{vort} + E_0 + \mu N}{2\pi} \\ &= \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) + 0.709505\dots + \ln(\alpha_{vort,\mu}) + \ln R - \Omega \frac{R^2}{2} + \frac{R^2}{4} - \frac{\ln 2}{\alpha_{vort,\mu}^2}\end{aligned}\tag{3.62}$$

In figuur 3.7 werd het energieverval  $\Delta E = E_N^{vort} - E_{\mu}^{vort}$  bij  $R = 1000$  weergegeven. Er is gekozen voor een specifieke waarde van  $R$ , maar zodra  $R$  groot genoeg is ( $R > 100$ ) is er geen zichtbare invloed van  $R$  op het energieverval  $\Delta E$ . De algemene trend is dat  $\Delta E$  daalt in functie van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Voor  $\Omega > 0.40$ , is  $\Delta E > 0$ , zodat het regime van constante chemische potentiaal energetisch voordeliger is. Voor  $\Omega < 0.40$ , is  $\Delta E < 0$ , zodat hier het regime van constant aantal deeltjes energetisch voordeliger is. Het verschil wordt natuurlijk veroorzaakt door het feit dat de toestand bij constant aantal deeltjes meer deeltjes telt dan bij constante chemische potentiaal. Hierdoor zullen alle bijdragen tot de energie toenemen. Langs de ene kant neemt de energiekost toe, die bepaald is door de bijdrage van de kwantumdruk, de kinetische energie en de interactie energie. Dit veroorzaakt de toename in energie bij  $\Omega < 0.40$  tegenover het regime bij constante chemische potentiaal. De energiewinst neemt echter ook toe. Deze energiewinst is bepaald door de bijdrage van het draaimoment en dus evenredig met  $\Omega$ . Hoe meer condensaas er meedraait, hoe groter deze energiewinst. Bij toenemende  $\Omega$  zal het verschil in de energiewinst toenemen, zodat deze vanaf  $\Omega = 0.40$  groter is dan het verschil in energiekost. Merk op dat we geen lineair verband tussen  $\Delta E$  en  $\Omega$  observeren, hoewel de energiewinst bij constant aantal deeltjes evenredig is met  $\Omega$ . Dit wordt veroorzaakt door het feit dat de vortexkern bij constante chemische potentiaal kleiner wordt als  $\Omega$  toeneemt, zodat het verschil in het aantal deeltjes tussen beide toestanden afneemt.

Nu we zowel  $\alpha_{vort}$  als  $\Delta E$  hebben bestudeerd, kunnen we evalueren of we bij een constant aantal deeltjes de benadering  $\mu = \mu_{bulk} = 1$  mogen maken. Bij deze benadering gaan we effectief over naar het regime van constante chemische potentiaal. We zien dat de kwaliteit van de benadering afhankelijk is van wat we willen bestuderen. Als we kleine energieverval of de grootte van de vortices willen bestuderen, is er een duidelijk verschil tussen beide regimes en is de keuze van het regime belangrijk. Als we de algemene trends van de energie van het systeem willen bestuderen of grote energieverval ( $\gg 1$ ), zijn beide regimes equivalent voor kleine rotatiefrequenties ( $\Omega \ll 1$ ). Deze benadering kunnen we maken aangezien de absolute waarde van de energie veel groter is dan het energieverval tussen de regimes ( $E_N^{vort} \gg \Delta E$ ,  $E_{\mu}^{vort} \gg \Delta E$ ), al is er dan wel enige voorzichtigheid geboden bij het interpreteren van de resultaten. Voor grote rotatiefrequenties wordt het verschil tussen beide regimes te groot en mogen we de benadering niet meer maken.



Figuur 3.7: Het energieverval  $\Delta E = E_N^{vort} - E_\mu^{vort}$  tussen de energie  $E_N^{vort}$  van een vortex bij constant aantal deeltjes en de energie  $E_\mu^{vort}$  van een vortex bij constante chemische potentiaal in functie van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Voor  $\Omega < 0.40$  is  $E_N > E_\mu$ . Voor  $\Omega > 0.40$  is  $E_N < E_\mu$ .



## Hoofdstuk 4

# Variationele behandeling van één skyrmion

In dit onderdeel passen we de technieken die we in het voorgaande hoofdstuk hebben gebruikt voor het geval van één vortex, opnieuw toe voor het geval van één skyrmion. We beginnen met het dimensieloos maken van de Gross-Pitaevskii energiefunctieaal. Vervolgens kiezen we een variationele probeergolffunctie met als parameter de skyrmiongrootte en zetten we deze om naar de pseudospin notatie. Daarna werken we de energiefunctieaal uit en minimaliseren we de energie om een uitdrukking te bekomen voor onze variationele parameter. Tot slot vullen we de bekomen waarde van de variationele parameter terug in om de energie van een skyrmion te bekomen.

### 4.1 Dimensieloze Gross-Pitaevskii energiefunctieaal

We kunnen onze Gross-Pitaevskii energiefunctieaal opnieuw dimensieloos maken. Dit gebeurt volledig analoog aan het geval van een ééncomponentenscondensaat. We beschouwen een cilindrisch condensaat waarbij de totale dichtheid  $\rho_T^2$  enkel nog afhangt van  $r$  (niet meer van  $\varphi$  en  $z$ ) en kiezen onze eenheden analoog aan sectie 3.1.1.

$$\tilde{r} = \frac{r}{\xi} \text{ met } \xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mg\rho_\infty^2}} \quad (4.1)$$

$$f(r) = \frac{\rho_T(r)}{\rho_\infty}$$

$$\tilde{\Omega} = \frac{\Omega}{\Omega_0} \text{ en } \omega_R = \frac{\omega_R}{\Omega_0} \text{ met } \Omega_0 = \frac{\hbar}{2m\xi^2} = \frac{g\rho_\infty^2}{\hbar} \quad (4.2)$$

$$\tilde{E} = \frac{E}{\varepsilon} \text{ met } \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\rho_\infty^2 L \quad (4.3)$$

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{\mu_\infty} \text{ met } \mu_\infty = g\rho_\infty^2 = \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} \quad (4.4)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{s,eff} = \frac{\mathbf{v}_{s,eff}}{v_0} \text{ met } v_0 = \frac{\hbar}{m}$$

Het enige verschil is dat we voor onze waarde van  $\rho_\infty$  en van  $g$  kunnen kiezen tussen de waarden voor beide componenten. We kiezen hier  $g = g_{11}$  en we noemen  $\beta = \frac{g_{22}}{g_{11}}$  en  $\gamma = \frac{g_{12}}{g_{11}}$ . Verder gebruiken we golffuncties waarbij de totale dichtheid  $\rho_T$  ver van de vortex constant is en gelijk aan  $\rho_\infty$ , wat ons meteen een manier oplevert om  $\rho_\infty$  te definiëren. Andere mogelijke keuzes zijn bvb.  $g = g_{22}$ ,  $g = g_{12}$ , of de waarde van  $\rho_1$  of  $\rho_2$

voor  $r \rightarrow \infty$  als waarde voor  $\rho_\infty$ . De dimensieloze Gross-Pitaevskii energie wordt uiteindelijk

$$E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] = 2\pi \int_0^R r dr \left\{ |\nabla f|^2 + \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 + f^2 [\mathbf{v}_{s,eff}^2 - \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{r} \times \mathbf{v}_{s,eff})] - \mu f^2 + \frac{f^4}{2} \left[ 1 + \frac{(\beta-1)}{4} (1-S_z)^2 + \frac{(\gamma-1)}{2} (1-S_z^2) \right] - \omega_R f^2 S_x \right\} \quad (4.5)$$

met

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \nabla \theta_T - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}] \nabla \phi \quad (4.6)$$

Hierbij hebben we de tildes reeds weggelaten en de integraal over  $\varphi$  uitgewerkt. Dit is een uitdrukking waarmee we gemakkelijk verder kunnen werken voor een specifieke golf functie. Om de verdere notatie te vereenvoudigen, kunnen we de verschillende termen apart benoemen:

- Bijdrage van de kwantumdruk:

$$\mathcal{E}_{qp} = (\nabla f)^2 \quad (4.7)$$

- Bijdrage van de pseudospin druk:

$$\mathcal{E}_{ps} = \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 \quad (4.8)$$

- Kinetische energie van het superfluide stromingsveld:

$$\mathcal{E}_{kin} = f^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 \quad (4.9)$$

- Interactie energie bij gelijke interactieconstanten ( $\gamma = \beta = 1$ ):

$$\mathcal{E}_{int} = -\mu f^2 + \frac{1}{2} f^4 \quad (4.10)$$

Voor  $\mu = \mu_{bulk} = 1$  is dit gelijk aan

$$\mathcal{E}_{int} = -f^2 + \frac{1}{2} f^4 = \frac{(1-f^2)^2}{2} - \frac{1}{2} \quad (4.11)$$

- Extra bijdrage tot de interactie energie als de interactieconstanten niet gelijk zijn:

$$\mathcal{E}_{magn} = \frac{f^4}{4} \left[ \frac{(\beta-1)}{2} (1-S_z)^2 + (\gamma-1) (1-S_z^2) \right] \quad (4.12)$$

We noemen dit de magnetische bijdrage, aangezien het effect van de extra interactieconstanten vergelijkbaar is met het effect van magnetische interacties op systemen met een magnetische spin. De factor  $(1-\beta)$  in de eerste term is equivalent met het effect van een magnetisch veld langs de z-as. Als  $\beta > 1$ , tracht deze term alle spins omhoog te richten ( $\mathbf{S} = \mathbf{e}_z$ ). Als  $\beta < 1$ , tracht deze alle spins omlaag te richten. Het effect van de andere term is vergelijkbaar met ferromagnetische interacties als  $\gamma > 1$  en met antiferromagnetische interacties als  $\gamma < 1$ . In het ene geval tracht deze term alle spins gelijk te richten langs de z-as en zo een homogeen condensaat van één component te bekomen. In het andere geval tracht deze term alle spins volgens het xy-vlak te richten en zo een gemengd condensaat te bekomen met evenveel component 1 als component 2.

- Rotatie energie:

$$\mathcal{E}_{rot} = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{L} = -f^2 \boldsymbol{\Omega} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{v}_{s,eff}) \quad (4.13)$$

- Rabi term:

$$\mathcal{E}_R = -\omega_R f^2 S_x \quad (4.14)$$

Deze bijdrage is nul voor een homogeen condensaat, een condensaat met één vortex en een condensaat met één skyrmion en zal dus verder niet meer meegenomen worden. Merk op dat deze term wel belangrijk wordt als men de tijdsevolutie van het systeem wil bestuderen.

Als we al deze bijdragen samenvoegen, bekomen we

$$E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] = 2\pi \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{ps} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{magn} + \mathcal{E}_{rot} \} \quad (4.15)$$



## 4.2 Het skyrmion: een gevulde vortex

In een tweecomponentscondensaat kunnen we proberen om de interactie energie en de kwantumdruk te verlagen, door te streven naar een homogende condensaatdichtheid ( $f = 1$ ). De dichtheid van de component waarvan de fase met  $2\pi$  toeneemt in een lus rond de vortex, moet naar nul gaan in de vortexkern. Deze kern moet dus opgevuld worden met condensaat van de tweede component. Zo bekomt men een skyrmion, oftewel een gevulde vortex.

Zonder verlies van algemeenheid, zullen we verder veronderstellen  $g_{22} \geq g_{11} \Leftrightarrow \beta \geq 1$ . Hierdoor maken we de keuze dat we een vortex van de eerste component opvullen met de tweede component, zodat veraf van de vortex  $S_z \rightarrow 1$ . Als  $\beta < 1$  zou zijn, zou het energetisch voordeliger zijn om een vortex van de tweede component te vormen en deze op te vullen met de eerste component, zodat ver van de vortex  $S_z \rightarrow -1$ . In dat geval moeten we gewoon beide condensaten van nummer verwisselen om het te herleiden tot het beschouwde geval  $\beta \geq 1$ . We leggen voorlopig nog geen restricties op voor  $\gamma$ .

Net zoals er verschillende probeergolffuncties mogelijk zijn voor een vortex, zijn er ook verschillende probeergolffuncties mogelijk voor een skyrmion of verschillende probeerspintexturen. Het bekendste voorbeeld is de spintextuur zoals voorgesteld door Tony Skyrme [11].

$$S_x = \frac{4\lambda x}{(x^2 + y^2) + 4\lambda^2} \quad (4.16)$$

$$S_y = \frac{-4\lambda y}{(x^2 + y^2) + 4\lambda^2} \quad (4.17)$$

$$S_z = \frac{(x^2 + y^2) - 4\lambda^2}{(x^2 + y^2) + 4\lambda^2} \quad (4.18)$$

Hierbij is  $\lambda$  de variationele parameter. Dit is equivalent met volgende probeergolffunctie in cilindercoördinaten:

$$\begin{cases} \psi_1 = \rho_\infty \sqrt{\frac{r^2}{r^2 + 4\lambda^2}} e^{i\varphi} \\ \psi_2 = \rho_\infty \sqrt{\frac{4\lambda^2}{r^2 + 4\lambda^2}} \end{cases} \quad (4.19)$$

De totale dichtheid is hier  $\rho_\infty^2$ . De equivalente dichtheidsfunctie (strikt genomen de wortel van de dichtheidsfunctie) in het geval van een vortex wordt gegeven door

$$f = \frac{r}{\sqrt{r^2 + 4\lambda^2}}. \quad (4.20)$$

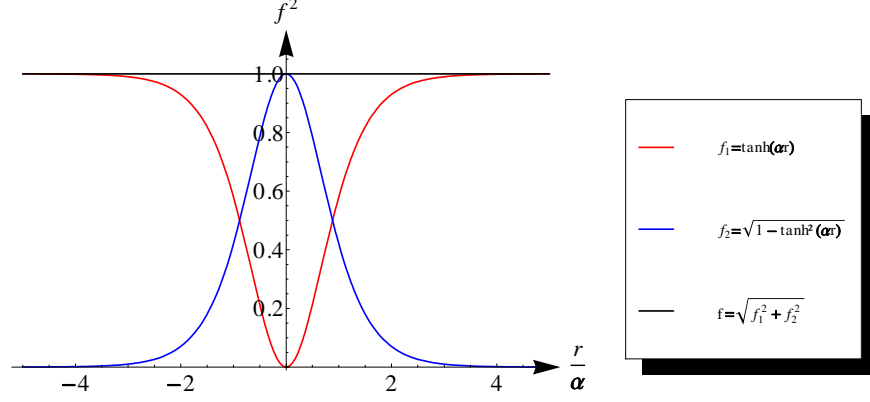
Deze variationele vorm is echter niet gepast voor een niet-gevulde vortex in een homogeen condensaat. Immers, als het condensaat niet exponentieel geneest vanaf de vortexkern, maar zoals  $\frac{1}{r}$ , is de energiekost om de vortex te vormen te groot. In [20] wordt dit opgelost door het invoegen van een extra exponentiële factor.

$$\begin{cases} \psi_1 = \rho_\infty \sqrt{\frac{r^2}{r^2 + 4\lambda^2 \exp(-\alpha r^2)}} e^{i\varphi} \\ \psi_2 = \rho_\infty \sqrt{\frac{4\lambda^2 \exp(-\alpha r^2)}{r^2 + 4\lambda^2 \exp(-\alpha r^2)}} \end{cases} \quad (4.21)$$

Hier hebben we ervoor gekozen om als probeergolffunctie van de eerste component de eerder gekozen probeergolffunctie voor een vortex uit sectie 3.2 te kiezen. Dit heeft twee grote voordelen. Ten eerste laat deze vorm het toe om vortices en skyrmionen met elkaar te vergelijken. Ten tweede is het veel eenvoudiger om met hyperbolische functies te werken dan met wortels van rationale functies met extra exponentiële factoren, zoals bij gebruik van (4.21) het geval is.

Nu we een keuze hebben gemaakt voor de probeergolffunctie van de eerste component, kunnen we de golffunctie van de tweede component vastleggen via  $|\psi_2|^2 = \rho_\infty^2 - |\psi_1|^2$ . De fase van de tweede component wordt gelijk aan nul gekozen.

$$\begin{cases} \psi_1 = \rho_\infty \tanh(\alpha r) e^{i\varphi} \\ \psi_2 = \rho_\infty \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r)} = \frac{\rho_\infty}{\cosh(\alpha r)} \end{cases} \quad (4.22)$$



Figuur 4.1: Dichtheidsprofiel van de verschillende componenten voor een skyrmion. De eerste component heeft het dichtheidsprofiel van een vortex. De tweede component heeft het complementaire profiel, zodat de totale dichtheid 1 is.

Dit profiel wordt weergegeven in figuur 4.1. Het heeft als totale dichtheid  $\rho_T^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = \rho_\infty^2$  of  $f^2 = \frac{\rho_T^2}{\rho_\infty^2} = 1$ . Deze is constant over heel het condensaat, zodat de kwantumdruk nul is,  $\mathcal{E}_{qp}^{skyrm} = (\nabla f)^2 = 0$ . De eerste term van de interactie energie is ook verlaagd (door de vortex te vullen),

$$\mathcal{E}_{int}^{skyrm} = \frac{(1 - f^2)^2}{2} - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} \quad (4.23)$$

Hierbij hebben we reeds de bulkwaarde voor de chemische potentiaal gebruikt ( $\mu = \mu_{bulk} = 1$ ). Dit is geen benadering, aangezien het vormen van een skyrmion het totale aantal deeltjes niet verandert. We moeten dus geen onderscheid maken tussen het regime met constante chemische potentiaal en constant aantal deeltjes, wat we wel moesten doen in het geval van één vortex.

De prijs die we betalen voor de verlaging van de bijdrage van de kwantumdruk en van de interactie energie, is dat de pseudospin niet meer constant is. De fasehoeken worden nu gegeven door

$$\begin{cases} \theta_T = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} = \frac{\varphi}{2} \\ \phi = \theta_2 - \theta_1 = -\varphi \end{cases} \quad (4.24)$$

Verder hebben we voor de menghoek of 'mixing angle' volgende vergelijkingen

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh(\alpha r) \\ \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh(\alpha r) \\ \frac{1}{\cosh(\alpha r)} \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

Voor de sinus en cosinus van de menghoek bekomen we dan

$$\cos(\alpha_{mix}) = \cos^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2 \tanh^2(\alpha r) - 1 \quad (4.26)$$

$$\sin(\alpha_{mix}) = 2 \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2 \frac{\tanh(\alpha r)}{\cosh(\alpha r)} \quad (4.27)$$

Dit hebben we nodig om uiteindelijk de pseudospin te bekomen, via (2.23).

$$\begin{cases} S_x = 2 \frac{\tanh(\alpha r)}{\cosh(\alpha r)} \cos \varphi \\ S_y = -2 \frac{\tanh(\alpha r)}{\cosh(\alpha r)} \sin \varphi \\ S_z = 2 \tanh^2(\alpha r) - 1 \end{cases} \quad (4.28)$$

Deze pseudospin structuur zorgt voor een extra energiekost,

$$\mathcal{E}_{ps}^{skyrm} = \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 = \frac{1}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 \quad (4.29)$$

We moeten dus  $(\nabla \mathbf{S})^2$  uitwerken. Dit kunnen we doen via

$$(\nabla \mathbf{S})^2 = (\nabla S_x)^2 + (\nabla S_y)^2 + (\nabla S_z)^2 = (\nabla \alpha_{mix})^2 + \sin^2(\alpha_{mix}) (\nabla \phi)^2 \quad (4.30)$$

of, als we niet expliciet  $\alpha_{mix}$  willen uitrekenen, via

$$(\nabla \mathbf{S})^2 = [\nabla \sin(\alpha_{mix})]^2 + [\nabla \cos(\alpha_{mix})]^2 + \sin^2(\alpha_{mix}) (\nabla \phi)^2 \quad (4.31)$$

We hebben hier gebruik gemaakt van de laatste uitdrukking. Na enig rekenwerk levert dit

$$\mathcal{E}_{ps}^{skyrm} = \frac{\alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)} \left( 1 + \frac{\tanh^2(\alpha r)}{(\alpha r)^2} \right). \quad (4.32)$$

Verder heeft de pseudospin structuur ook invloed op de interactie energie, via

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{magn} &= \frac{f^4}{4} \left[ \frac{(\beta-1)}{2} (S_z - 1)^2 + (\gamma-1) (1 - S_z^2) \right] \\ &= \left[ \frac{(\beta-1)}{2} \frac{1}{\cosh^4(\alpha r)} + (\gamma-1) \frac{\tanh^2(\alpha r)}{\cosh^2(\alpha r)} \right] \end{aligned} \quad (4.33)$$

waarbij we reeds uitdrukking (4.26) voor  $S_z = \cos(\alpha_{mix})$  hebben ingevuld. Tenslotte hebben we nog een bijdrage van het draaimoment en een bijdrage van de kinetische energie. Om deze bijdragen te berekenen, moeten we eerst het effectieve snelheidsveld uitrekenen.

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{s,eff} &= \nabla \theta_T - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}] \nabla \phi \\ &= \frac{1}{r} \tanh^2(\alpha r) \mathbf{e}_\varphi \end{aligned} \quad (4.34)$$

Dit vullen we dan in in onze uitdrukking voor de rotatie energie,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{rot}^{skyrm} &= -f^2 \boldsymbol{\Omega} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{v}_{s,eff}) \\ &= \left( r \mathbf{e}_r \times \frac{1}{r} \tanh^2(\alpha r) \mathbf{e}_\varphi \right) = -\Omega \tanh^2(\alpha r) \end{aligned} \quad (4.35)$$

en vervolgens ook in de uitdrukking voor de kinetische energie.

$$\mathcal{E}_{kin}^{skyrm} = f^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 = \frac{1}{r^2} \tanh^4(\alpha r) \quad (4.36)$$

We hebben nu alle elementen om de totale Gross-Pitaevskii energiefunctonaal (4.15) uit te rekenen.

$$\begin{aligned} E_{GP}^{skyrm} &= 2\pi \int_0^R r dr \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)} \left( 1 + \frac{\tanh^2(\alpha r)}{(\alpha r)^2} \right) + \frac{1}{r^2} \tanh^4(\alpha r) - \frac{1}{2} - \Omega \tanh^2(\alpha r) \right. \\ &\quad \left. + \left[ \frac{(\beta-1)}{2} \frac{1}{\cosh^4(\alpha r)} + (\gamma-1) \frac{\tanh^2(\alpha r)}{\cosh^2(\alpha r)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Aangezien  $\frac{1}{\cosh^2(\alpha r)} + \tanh^2(\alpha r) = 1$ , is dit dus gelijk aan

$$\begin{aligned} E_{GP}^{skyrm} &= 2\pi \int_0^R r dr \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)} + \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2} - \frac{1}{2} - \Omega \tanh^2(\alpha r) \right. \\ &\quad \left. + \left[ \frac{(\beta-1)}{2} \frac{1}{\cosh^4(\alpha r)} + (\gamma-1) \frac{\tanh^2(\alpha r)}{\cosh^2(\alpha r)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.38)$$

Voor gelijke interactieconstanten ( $\beta = 1, \gamma = 1$ ) bevat deze uitdrukking bijna dezelfde termen als uitdrukking (3.26) voor de energie van een vortex. Enkel een deel van de interactie energie (de energie om het oog van de vortex te boren) ontbreekt hier. We doen dus netto energiewinst! Voor algemene waarden van de interactieconstanten ligt het iets ingewikkelder en moeten we de energiminimalisatie werkelijk uitvoeren voor we conclusies kunnen trekken. Dat is dan ook wat we in het volgende onderdeel zullen doen.

Merk op dat als we  $\omega_R$  niet nul hadden gesteld, deze term hier toch nul zou worden.

$$\begin{aligned}
E_R^{skyrm} &= -\omega_R \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\varphi f^2 S_x \\
&= -\omega_R \int_0^R r dr \int_0^{2\pi} d\varphi f^2 \sin(\alpha_{mix}) \cos \phi \\
&= -2\omega_R \left( \int_0^R r dr \frac{\sinh(\alpha r)}{\cosh^2(\alpha r)} \right) \left( \int_0^{2\pi} d\varphi \cos(-\varphi) \right) = 0
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Deze laatste uitdrukking kunnen we nul stellen, omdat  $\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi = 0$ .

### 4.3 Uitwerken van de energie

We vertrekken van onze uitdrukking (4.37) voor de variationele energie van het skyrmion en we schrijven de integratie over  $r$  om naar een integratie over  $x = \alpha r$ . Net zoals we bij de berekening voor vortex in een ééncomponentenscondensaat hebben gedaan in deel 3.3, trekken we de energie  $E_0 = \frac{2\pi}{\alpha^2} \int_0^{\alpha R} x dx \left\{ -\frac{1}{2} \right\}$  van een homogeen condensaat van de uitdrukking af.

$$\begin{aligned}
E_{GP}^{skyrm} - E_0 &= 2\pi \left\{ \int_0^{\alpha R} x dx \frac{1}{\cosh^2 x} \left( 1 + \frac{\tanh^2 x}{x^2} \right) + \int_0^{\alpha R} x dx \frac{\tanh^4 x}{x^2} - \frac{1}{\alpha^2} \Omega \int_0^{\alpha R} x dx \tanh^2 x \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\alpha^2} \left[ \frac{(\beta-1)}{2} \int_0^{\alpha R} x dx \frac{1}{\cosh^4 x} + (\gamma-1) \int_0^{\alpha R} x dx \frac{\tanh^2 x}{\cosh^2 x} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Van de overblijvende integralen, convergeert de eerste voor  $R \rightarrow \infty$ . Deze rekenen we eerst uit.

$$\begin{aligned}
\lim_{R \rightarrow \infty} \left( \frac{E_{ps}^{skyrm}}{2\pi} \right) &= \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{1}{\cosh^2 x} \left( 1 + \frac{\tanh^2 x}{x^2} \right) \right\} \\
&= \ln 2 + 0.384928 \dots
\end{aligned} \tag{4.41}$$

De volgende twee integralen divergeren voor  $R \rightarrow \infty$ , maar we kunnen de divergentie afzonderen van  $\alpha$ . De bijdrage van de pseudospin gradiënt is analoog aan de integraal  $\int_0^{\alpha R} dx \frac{\tanh^2 x}{x}$  die reeds werd uitgewerkt in sectie 3.2. We passen dezelfde techniek toe om de divergentie weg te werken. Voor  $R \rightarrow +\infty$  levert dit

$$\begin{aligned}
\frac{E_{kin}^{skyrm}}{2\pi} &= \int_0^{\alpha R} dx \frac{\tanh^4 x}{x} = \int_0^{\alpha R} dx \frac{\tanh^2 x}{x} - \int_0^{\alpha R} \frac{dx \tanh^2 x}{x \cosh^2 x} \\
&= \ln(\alpha) + \ln(R) + \int_0^1 \frac{\tanh^2 x}{x} dx - \int_1^{\alpha R} \frac{1}{\cosh^2 x} \frac{dx}{x} - \int_0^{\alpha R} \frac{dx \tanh^2 x}{x \cosh^2 x} \\
&\approx \ln(\alpha) + \ln(R) + 0.209505 \dots - 0.384928 \dots
\end{aligned} \tag{4.42}$$

Hierbij hebben we de overblijvende integralen voor  $R \rightarrow \infty$  numeriek uitgewerkt in Mathematica. De bijdrage van de rotatie energie kunnen we eveneens splitsen in een convergerend en een divergerend deel.

$$\begin{aligned} \frac{E_{rot}^{skyrms}}{2\pi} &= -\frac{\Omega}{\alpha^2} \int_0^{\alpha R} x dx \tanh^2 x \\ &= -\frac{\Omega}{\alpha^2} \left[ \int_0^{\alpha R} x dx - \int_0^{\alpha R} x dx (1 - \tanh^2 x) \right] \\ &= -\frac{\Omega}{\alpha^2} \left[ \frac{\alpha^2 R^2}{2} - \ln [\cosh(\alpha R)] + (\alpha R) \tanh(\alpha R) \right] \end{aligned} \quad (4.43)$$

Voor  $R \rightarrow +\infty$  gaan de laatste twee termen naar  $-\ln 2$ , zodat in dat geval

$$\frac{E_{rot}^{skyrms}}{2\pi} = -\Omega \frac{R^2}{2} + \frac{\Omega \ln 2}{\alpha^2} \quad (4.44)$$

De laatste term is de interactie energie. De overblijvende integralen convergeren, zodat voor  $R \rightarrow +\infty$  geldt

$$\begin{aligned} \frac{E_{int}^{skyrms}}{2\pi} &= \frac{1}{\alpha^2} \left[ \frac{(\beta - 1)}{2} \int_0^{+\infty} x dx \frac{1}{\cosh^4 x} + (\gamma - 1) \int_0^{+\infty} x dx \frac{\tanh^2 x}{\cosh^2 x} \right] \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \left[ (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right] \end{aligned} \quad (4.45)$$

Verder is de bijdrage van de kwantumdruk nul ( $E_{qp} = 0$ ). We kunnen de uitgewerkte integralen nu terug invullen in (4.40). Voor alle convergerende termen vullen we de waarde in voor  $R \rightarrow \infty$ . We maken dus de aanname dat ons condensaat groot is. De divergerende termen laten we in functie van  $R$  staan.

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}^{skyrms}}{2\pi} &= \frac{E_{GP}^{skyrms} - E_0}{2\pi} = \ln 2 + \ln(\alpha) + \ln(R) + 0.209505 \dots - \Omega \frac{R^2}{2} \\ &\quad + \frac{1}{\alpha^2} \left[ \Omega \ln 2 + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right] \end{aligned} \quad (4.46)$$

De verschillende bijdragen tot de energie worden in functie van de variationele parameter  $\alpha$  weergegeven in figuur 4.2, waarbij de termen die nog afhangen van  $R$  niet werden meegerekend om de  $\alpha$ -afhankelijkheid beter weer te geven. De interactie energie werd gesplitst in twee termen,

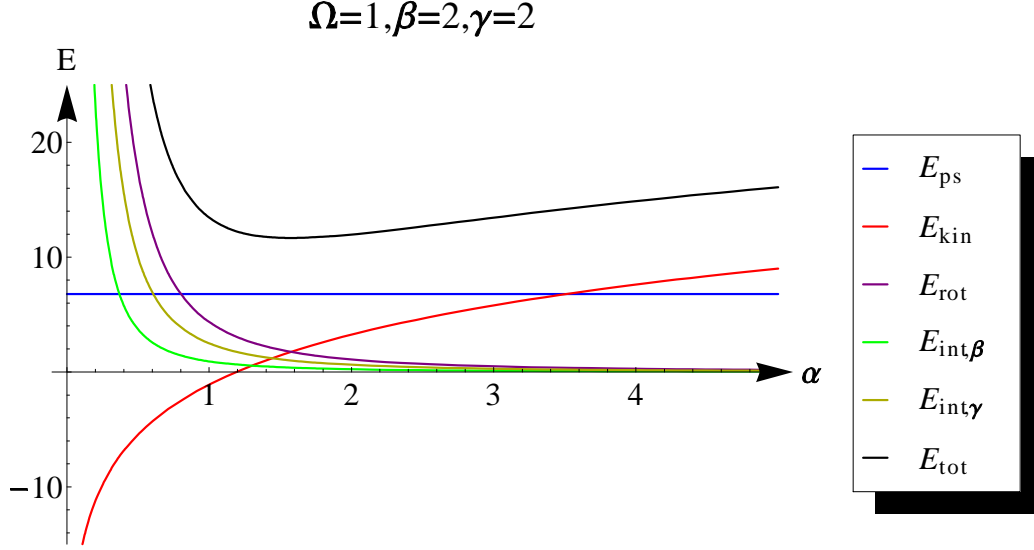
$$E_{int,\beta} = \frac{1}{\alpha^2} (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12} \quad (4.47)$$

$$E_{int,\gamma} = \frac{1}{\alpha^2} (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \quad (4.48)$$

zodat we de invloed van  $\beta$  en  $\gamma$  apart kunnen bestuderen. De invloed van  $(\beta - 1)$  en  $(\gamma - 1)$  op de energie als functie van  $\alpha$  is gelijkaardig als de invloed van de rotatiefrequentie  $\Omega$ . Zowel  $E_{int,\beta}$ ,  $E_{int,\gamma}$  als  $E_{rot}$  zijn evenredig met  $\frac{1}{\alpha^2}$ . De interactieconstanten hebben dus een effect op de effectieve rotatiefrequentie  $\Omega_{eff}$  die het skyrmion voelt. Deze wordt gegeven door

$$\Omega_{eff} = \Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2}. \quad (4.49)$$

De grootte van een skyrmion bij rotatiefrequentie  $\Omega$  en interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  is dus hetzelfde als dat van een skyrmion bij rotatiefrequentie  $\Omega_{eff}$  en gelijke interactieconstanten ( $\beta = \gamma = 1$ ). Merk op dat we de parallel van de effectieve rotatiefrequentie niet volledig kunnen doortrekken, aangezien er nog een term  $-\Omega \frac{R^2}{2}$  voorkomt in de uitdrukking (4.46) voor de energie, terwijl er geen equivalente term in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  aanwezig is.



Figuur 4.2: De verschillende bijdragen tot de energie van het skyrmion in functie van de variationele parameter  $\alpha$  bij  $\Omega = 1$ ,  $\beta = 2$  en  $\gamma = 2$ . De twee bijdragen tot de interactie energie hebben een gelijkaardig gedrag als de bijdrage van het draaimoment. De termen die nog afhangen van  $R$  werden niet meegerekend om de  $\alpha$ -afhankelijkheid beter weer te geven.

#### 4.4 Grootte van het skyrmion

We kunnen de afgeleide van de energie (4.46) van het skyrmion naar  $\alpha$  nu nul stellen om een uitdrukking te bekomen voor de optimale waarde van de variationele parameter  $\alpha$ . De divergerende termen hangen niet meer af van  $R$ , zodat deze weg zullen vallen in de minimalisatie.

$$0 = \frac{\partial E_{tot}^{skym}}{\partial \alpha} = 2\pi \left\{ \frac{1}{\alpha} - \frac{2}{\alpha^3} \left[ 2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12} + (1 - \gamma) \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right] \right\} \quad (4.50)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\alpha} \left\{ 1 - \frac{1}{\alpha^2} \left[ 2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right] \right\} = 0 \quad (4.51)$$

De eerste mogelijke oplossing is  $\alpha = \infty$ . In dat geval zou het skyrmion oneindig klein worden en stelt onze golf functie een homogeen, roterend condensaat van de eerste component voor. Een Bose-Einstein condensaat is echter irrotationeel, waardoor deze oplossing niet fysisch is. De andere oplossing is

$$\alpha_{skym} = \sqrt{2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{3}} \quad (4.52)$$

$$= \sqrt{2 \ln 2\Omega_{eff}} \quad (4.53)$$

Hierbij hebben we de definitie van  $\Omega_{eff}$  uit (4.49) gebruikt. Dit is enkel een geldige oplossing als de uitdrukking onder de wortel groter is dan nul, dus als  $\Omega_{eff} > 0$ . Dit vertaalt zich in de voorwaarde

$$\Omega > 0.79 - 0.57\gamma - 0.21\beta \Leftrightarrow \gamma > 1.37 - 0.37\beta - 1.74\Omega \quad (4.54)$$

Voor kleine waarden van  $\Omega$  is dit benaderend

$$\gamma > 1.37 - 0.37\beta \quad (4.55)$$

We vinden dus dat er enkel een stabiele oplossing voor het skyrmion bestaat als de rotatiefrequentie  $\Omega$  en de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  groot genoeg zijn. Hoe komt dit? De grootte van het skyrmion wordt bepaald

door de balans tussen de kinetische energie, de interactie energie en de rotatie energie. Hoe groter we het skyrmion maken, hoe minder bewegende component 1 en hoe lager de kinetische energie. Om het skyrmion groter te maken, moeten we echter ook rotatie energie betalen, aangezien de energiewinst die we maken door de eerste component mee te laten roteren verkleint. Verder moeten we ook interactie energie betalen: de tweede component heeft een grotere interactieconstante en dus een grotere interactie energie dan de eerste component. Merk op dat het ook mogelijk is dat we interactie energie winnen door het skyrmion groter te maken. Dit is het geval als de interactieconstante  $\gamma$  die de interactie tussen de twee componenten onderling bepaalt klein genoeg is.

De balans tussen de energiewinst en de energiekost om een skyrmion groter te maken houdt het skyrmion stabiel. Hoe groter  $\Omega$ ,  $\beta$  en  $\gamma$ , hoe kleiner het skyrmion (en hoe groter  $\alpha$ ). Als de rotatiefrequentie  $\Omega$  en de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  echter niet groot genoeg zijn, wordt de energiewinst uit de kinetische energie niet voldoende gecompenseerd door de rotatie energie en de interactie energie. Het is dan voor elke waarde van  $\alpha$  energetisch voordeliger om het skyrmion groter te maken. Het skyrmion 'plooit' open en vormt een homogeen condensaat van de tweede component. Een stilstaand homogeen condensaat van de eerste component is natuurlijk altijd energetisch voordeliger, maar deze toestand zit niet vervat in onze aanname voor de probeergolffunctie. Deze aanname is dus niet meer geldig en de gekozen probeergolffunctie is geen goede beschrijving meer voor het systeem. De stabiliteitsvoorwaarde (4.54) bepaalt bij welke waarden van  $\Omega$ ,  $\beta$  en  $\gamma$  dit gebeurt.

## 4.5 Energie van het skyrmion

We kunnen nu de optimale waarde  $\alpha_{skyrm}$  van de variationele parameter  $\alpha$  uit (4.52) terug invullen in (4.46) om de energie van het skyrmion te bekomen. Verder isoleren we de termen die nog afhangen van  $R$  in  $E_R^{skyrm}$ .

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}^{skyrm} - E_R^{skyrm}}{2\pi} &= \frac{E_{tot}^{skyrm}}{2\pi} - \ln(R) + \Omega \frac{R^2}{2} \\ &= \ln 2 + \ln(\alpha_{skyrm}) + 0.709505 \dots \\ &= \ln 2 + \frac{1}{2} \ln \left[ 2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right] + 0.709505 \dots \end{aligned} \quad (4.56)$$

We hebben eerder in (4.49) de effectieve rotatiefrequentie  $\Omega_{eff}$  ingevoerd. We kunnen  $\Omega_{eff}$  splitsen in een bijdrage van de werkelijke rotatiefrequentie  $\Omega$  en een bijdrage  $\Omega_{int}$  van de interactieconstanten.

$$\Omega_{eff} = \Omega + \Omega_{int} \quad (4.57)$$

$$\Omega_{int} = (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2} \quad (4.58)$$

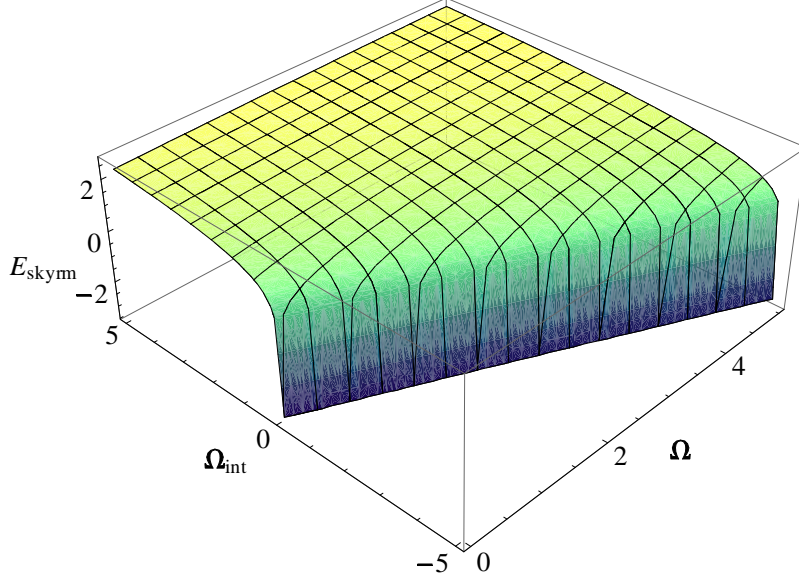
Dit laat ons toe de energie van het skyrmion te schrijven als een functie van twee variabelen:  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$ .

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}^{skyrm} - E_R^{skyrm}}{2\pi} &= \ln 2 + \frac{1}{2} \ln [2 \ln 2 (\Omega + \Omega_{int})] + 0.709505 \dots \\ &= \ln 2 + \frac{1}{2} \ln [2 \ln 2] + \frac{1}{2} \ln [\Omega + \Omega_{int}] + 0.709505 \dots \end{aligned} \quad (4.59)$$

Het grote voordeel hiervan is dat we de energie in functie van twee variabelen kunnen plotten, terwijl dat niet mogelijk is in functie van drie variabelen. Dit hebben we dan ook gedaan in figuur 4.3. Het verband met  $\gamma$  en  $\beta$  blijft toch nog duidelijk door het feit dat  $\Omega_{int}$  recht evenredig is met  $(\gamma - 1)$  en  $(\beta - 1)$ . We zien duidelijk dat de energie van het skyrmion logaritmisches gaat in functie van  $\Omega$ ,  $\beta$  en  $\gamma$ . De energie van het skyrmion is dus het laagste voor kleine waarden van  $\Omega$ ,  $\beta$  en  $\gamma$ .

We kunnen ook onderzoeken in welke gevallen de energie van het skyrmion kleiner is dan de energie  $E_0$  van een homogeen condensaat en  $E_{tot}^{skyrm} = E_{GP}^{skyrm} - E_0 < 0$ . We maken gebruik van uitdrukking (4.56) voor  $E_{tot}^{skyrm}$ .

$$\frac{E_{tot}^{skyrm}}{2\pi} = \ln 2 + \ln(\alpha_{skyrm}) + 0.709505 \dots + \ln(R) - \Omega \frac{R^2}{2} \quad (4.60)$$



Figuur 4.3: De energie  $E_{skym} = E_{tot}^{skym} - E_R^{skym}$  van het skyrmion in functie van de rotatiefrequentie  $\Omega$  en de interactiefrequentie  $\Omega_{int}$ . Hoe groter  $\Omega$  en hoe groter  $\Omega_{int}$ , hoe groter de energie. Enkel waarden die binnen de stabiliteitsvoorwaarde  $\Omega + \Omega_{int} > 0$  vallen worden weergegeven.

Als  $R$  groot is, worden de dominante termen in deze uitdrukking gegeven door de termen die  $R$  bevatten. Bij benadering kunnen we de voorwaarde  $E_{tot}^{skym} < 0$  dus schrijven als

$$E_{tot}^{skym} \approx \ln(R) - \Omega \frac{R^2}{2} < 0 \quad (4.61)$$

$$\Leftrightarrow \Omega > \frac{\ln(R^2)}{R^2} \quad (4.62)$$

Voor een skyrmion vinden we dus dezelfde kritische rotatiefrequentie

$$\Omega_{crit} = \frac{\ln(R^2)}{R^2} \quad (4.63)$$

die eerder in (3.45) reeds werd afgeleid voor een vortex. Voor rotatiefrequenties kleiner dan de kritische rotatiefrequentie zal het energetisch niet voordelig zijn om een skyrmion te vormen. Boven de kritische rotatiefrequentie is dit wel energetisch voordelig en zal er een skyrmion gevormd worden (op voorwaarde dat het skyrmion ook energetisch voordeliger is dan een vortex, want anders zal er een vortex gevormd worden).



# Hoofdstuk 5

## Vergelijking vortex-skyrmion

In hoofdstuk 3 en 4 hebben we de energie van een vortex en van een skyrmion bestudeerd. In dit hoofdstuk zullen we de energie van beide topologische excitaties vergelijken en onderzoeken voor welke waarden van de parameters  $\Omega$ ,  $\beta$  en  $\gamma$  het skyrmion energetisch voordeliger is dan een vortex. Voor de vortex maken we hierbij het onderscheid tussen het regime van constante chemische potentiaal en het regime van constant aantal deeltjes. Voor een skyrmion zijn beide regimes equivalent.

### 5.1 Constante chemische potentiaal

#### 5.1.1 Bij gelijke interactieconstanten

Bij gelijke interactieconstanten is het interessant om de verschillende bijdragen tot de energie van het skyrmion uit (4.37) in een tabel te vergelijken met de bijdragen tot de energie van de vortex uit (3.26).

Door de vortices te vullen wordt de kwantumdruk omgezet in pseudospin-structuur: de pseudospins worden ten opzichte van elkaar verdraaid. De som van de kwantumdruk en de kinetische energie blijft hierbij gelijk aan de som van de pseudospin druk en de kinetische energie. Ook het draaimoment blijft gelijk in beide gevallen, maar de energie die nodig is om het condensaat weg te duwen uit de vortexkern wordt niet gecompenseerd door een andere term in de skyrmionenergie. Hierdoor heeft een gevulde vortex of skyrmion een lagere energie dan een lege vortex. Merk op dat we hier een vortex en een skyrmion met dezelfde grootte hebben vergeleken. Het skyrmion kan een andere grootte hebben dan de vortex, maar omdat we een energiminimum zoeken, zal de best passende skyrmiongolffunctie sowieso een lagere energie hebben dan de oplossing met dezelfde grootte als de optimale vortexgolffunctie. Als een skyrmion met dezelfde grootte als de vortex dus een lagere energie heeft dan een lege vortex, heeft de best passende skyrmiongolffunctie ook een lagere energie dan een lege vortex. We moeten hierbij wel nog nagaan of de skyrmionoplossing stabiel is.

	Lege vortex	Gevulde vortex (skyrmion)
$\mathcal{E}_{qp}$	$\frac{\alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)}$	0
$\mathcal{E}_{ps}$	0	$\frac{4\alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)} + \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2 \cosh^2(\alpha r)}$
$\mathcal{E}_{kin}$	$\frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2}$	$\frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2} - \frac{\tanh^2(\alpha r)}{r^2 \cosh^2(\alpha r)}$
$\mathcal{E}_{int}$	$\frac{1}{2 \cosh^4(\alpha r)} - \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\mathcal{E}_{rot}$	$-\Omega \tanh^2(\alpha r)$	$-\Omega \tanh^2(\alpha r)$

Tabel 5.1: De verschillende bijdragen tot de energie van de vortex en de energie van het skyrmion bij gelijke interactieconstanten. Bij het vullen van de vortex worden verschillende bijdragen in elkaar omgezet. Enkel de bijdrage van de interactie energie die te wijten is aan de energiekost om het condensaat in de vortexkern te vernietigen wordt niet gecompenseerd door een equivalente term voor het skyrmion. We doen dus netto energiewinst!

### 5.1.2 Veralgemening

Voor algemene waarden van de interactieconstanten blijft gelden dat we bij het vullen van een vortex de energie winnen die we moeten betalen om het condensaat in de kern van de vortex te vernietigen. We krijgen dan echter ook een extra bijdrage tot de interactie energie, te wijten aan de aanwezigheid van de tweede component. Dit maakt de vergelijking iets ingewikkelder, waardoor we naar de werkelijke waarde van de minimale energie zullen moeten kijken om conclusies te kunnen trekken. We verzamelen eerst de resultaten van de berekeningen uit de voorgaande hoofdstukken.

De energie van een vortex is gegeven door (3.43),

$$\frac{E_{tot}^{vort}}{2\pi} = \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + \ln(\alpha_{vort}) + \ln(R) + 0.709505 \dots - \Omega \frac{R^2}{2} \quad (5.1)$$

met  $\alpha_{vort}$  volgens (3.42).

$$\alpha_{vort} = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6} + 2\Omega \ln 2} \quad (5.2)$$

De energie van een skyrmion is gegeven door (4.56),

$$\frac{E_{tot}^{skymion}}{2\pi} = \ln 2 + \ln(\alpha_{skymion}) + \ln(R) + 0.709505 \dots - \frac{\Omega R^2}{2} \quad (5.3)$$

met  $\alpha_{skymion}$  volgens (4.52).

$$\alpha_{skymion} = \sqrt{2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{3}} \quad (5.4)$$

$$= \sqrt{2 \ln 2 (\Omega + \Omega_{int})} \quad (5.5)$$

Als we willen weten of het skyrmion energetisch voordeliger is dan een vortex, moeten we uitdrukking (5.1) en (5.3) van elkaar aftrekken.

$$\frac{\Delta E}{2\pi} = \frac{E_{tot}^{vort} - E_{tot}^{skymion}}{2\pi} = - \left( \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right) + \ln \left( \frac{\alpha_{vort}}{\alpha_{skymion}} \right) \quad (5.6)$$

De laatste drie termen in  $E_{tot}^{vort}$  en  $E_{tot}^{skymion}$  zijn hetzelfde en vallen tegenover elkaar weg. Dit zijn net de termen die de grootte  $R$  van het condensaat bevatten, waardoor het energieverval niet meer afhangt van de grootte van het condensaat. De overblijvende uitdrukking voor het energieverval hangt enkel af van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  en de rotatiefrequentie  $\Omega$ , omdat deze samen  $\alpha_{vort}$  en  $\alpha_{skymion}$  bepalen. Als  $\Delta E > 0$ , is het skyrmion energetisch voordeliger dan de vortex. Als  $\Delta E < 0$ , is de vortex energetisch voordeliger dan het skyrmion. Bij  $\Delta E = 0$ , heeft een skyrmion dezelfde energie als een vortex. Merk op dat we hier twee termen in het energieverval vinden. De eerste term is het voorziene energieverval  $-\left(\frac{2 \ln 2 + 1}{6}\right)$  dat te wijten is aan het energieverval tussen het vernietigen van het condensaat in de vortexkern en het verdraaien van de pseudospin om een skyrmion te vormen. De tweede term is te wijten aan het verschil in kinetische energie dat optreedt als het skyrmion niet dezelfde grootte heeft als de vortex. We kunnen nu de uitdrukkingen voor  $\alpha_{vort}$  en  $\alpha_{skymion}$  invullen in (5.6), om de voorwaarde  $\Delta E > 0$  (waarbij skyrmionen energetisch voordeliger zijn) om te vormen naar een voorwaarde voor  $\beta$  en  $\gamma$ . Dit levert

$$\gamma < \left[ \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) \frac{4 \ln 2 - 1}{4 \ln 2 + 2} + \left( \frac{8 \ln 2 + 1}{4 \ln 2 + 2} \right) \right] + \left[ \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) - 1 \right] \frac{6 \ln 2}{2 \ln 2 + 1} \Omega - \beta \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{4 \ln 2 + 2} \right) \quad (5.7)$$

$$\Leftrightarrow \gamma < 1.54 - 0.37\beta - 0.96\Omega \quad (5.8)$$

In functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$  kunnen we deze voorwaarde ook nog schrijven als

$$\Omega_{int} < \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} + \left[ \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) - 1 \right] \Omega \quad (5.9)$$

$$\Leftrightarrow \Omega_{int} < 0.01 - 0.55\Omega \quad (5.10)$$

### 5.1.3 Opstellen van de fasediagrammen

We kunnen nu een fasediagram opstellen waarin we weergeven voor welke parameters skyrmionen domineren en voor welke vortices domineren. We hebben drie verschillende voorwaarden die de grenzen van de gebieden bepalen:

- Stabiliteitsvoorwaarde voor het skyrmion uit (4.54):  $\gamma > 1.37 - 0.37\beta - 1.74\Omega$   
Als deze niet vervuld is, kunnen er geen skyrmionen gevormd worden, maar mogelijk wel nog vortices.
- Energievoorwaarde  $\Delta E = E_{tot}^{vort} - E_{tot}^{skym} > 0$  uit (5.8):  $\gamma < 1.54 - 0.37\beta - 0.96\Omega$   
Als deze vervuld is, zijn skyrmionen energetisch voordeliger dan vortices. Als deze niet vervuld is, zijn vortices energetisch voordeliger dan skyrmionen.
- Voorwaarde voor fasescheiding [1]:  $\gamma^2 > \beta$   
Als deze voorwaarde vervuld is, ontmengen de componenten zich en kunnen er geen skyrmionen gevormd worden. Er kunnen dan wel nog vortices gevormd worden.

Deze grenzen geven aanleiding tot vier verschillende gebieden:

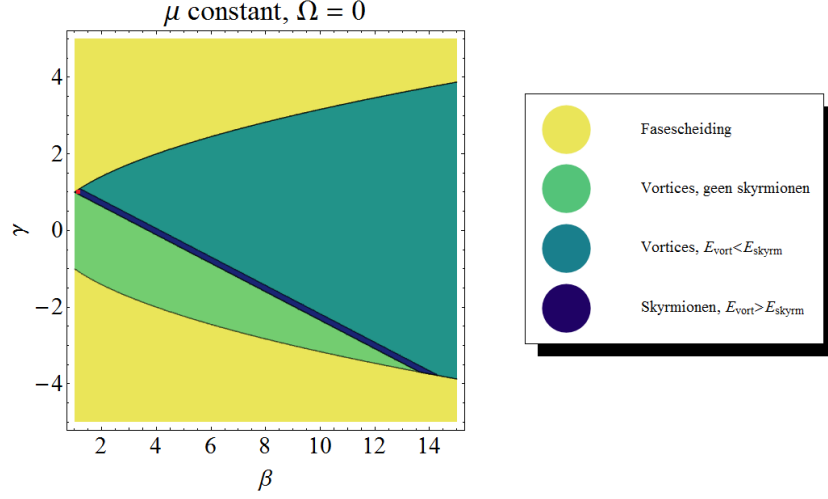
- $\gamma^2 > \beta$ : Fasescheiding of ontmengen van de componenten. In de volgende gebieden geldt ook de extra voorwaarde  $\gamma^2 < \beta$ , maar deze zullen we niet expliciet vermelden.
- $\gamma < 1.37 - 0.37\beta - 1.74\Omega$ : Skyrmionen zijn niet stabiel, zodat er enkel vortices gevormd kunnen worden.
- $\gamma > 1.37 - 0.37\beta - 1.74\Omega$  en  $\gamma < 1.54 - 0.37\beta - 0.96\Omega$ : Skyrmionen zijn energetisch voordeliger dan vortices. Beide grenzen zijn evenwijdige rechten.
- $\gamma > 1.54 - 0.37\beta - 0.96\Omega$ : Vortices zijn energetisch voordeliger dan skyrmionen.

Hierbij moeten we wel nog in gedachten houden dat de vortices of skyrmionen enkel gevormd zullen worden als de rotatiefrequentie  $\Omega$  groter is dan de kritische rotatiefrequentie  $\Omega_{crit} = \frac{\ln R^2}{R^2}$ , zoals deze werd afgeleid voor een groot condensaat in (3.45) voor vortices en in (4.63) voor skyrmionen. Als  $\Omega < \Omega_{crit}$ , is de grondtoestand het condensaat zonder topologische excitaties en zijn de beschouwde topologische toestanden metastabiel. Als  $\Omega > \Omega_{crit}$  zijn de beschouwde excitaties stabiel. Als voorbeeld rekenen we  $\Omega_{crit}$  uit voor  $R = 100$ :  $\Omega_{crit} = 9.2 \times 10^{-4}$ . De kritische rotatiefrequentie is dus erg klein en hangt sterk af van de grootte van het systeem. Daarom hebben we ervoor gekozen om niet weer te geven in de fasediagrammen of de beschouwde toestand stabiel is of metastabiel: we zouden voor elk systeem een ander fasediagram moeten maken.

In figuren 5.1 en 5.2 werd het hierboven beschreven fasediagram geplot voor verschillende waarden van  $\Omega$ . Daar zien we dus dat er voor  $\Omega = 0$  inderdaad een smalle strook is waar skyrmionen domineren. Als  $\Omega$  toeneemt, verschuiven de grenzen van het gebied naar lagere  $\gamma$ . Bovendien schuiven de grenzen uit elkaar, zodat het gebied groter wordt. Dat zien we in figuur 5.2 voor  $\Omega = 0.5$  en  $\Omega = 1$ . Als  $\Omega$  nog verder stijgt, dalen de grenzen verder tot deze uiteindelijk in het gebied terecht komen waar de twee componenten zullen ontmengen. Dit zien we in figuur 5.2 bij  $\Omega = 2$ . Vanaf  $\Omega = 1.17$  is er geen gebied meer waar het skyrmion instabiel is. Vanaf  $\Omega = 2.31$  is er ook geen gebied meer waar skyrmionen domineren en is de vortex overall energetisch voordeliger dan het skyrmion

We kunnen ook een gelijkaardig fasediagram opstellen in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$ . Dit heeft als voordeel dat we zowel de  $\Omega$ -afhankelijkheid als de afhankelijkheid van de interactieconstanten in één figuur kunnen weergeven. We hebben nu volgende voorwaarden die de grenzen van de gebieden in het fasediagram bepalen:

- Stabiliteitsvoorwaarde voor het skyrmion:  $\Omega_{int} + \Omega > 0$   
Als deze niet vervuld is, kunnen er geen skyrmionen gevormd worden, maar mogelijk wel nog vortices.
- Energievoorwaarde  $\Delta E = E_{tot}^{vort} - E_{tot}^{skym} > 0$  uit (5.10):  $\Omega_{int} < 0.01 - 0.55\Omega$   
Als deze vervuld is, zijn skyrmionen energetisch voordeliger dan vortices. Als deze niet vervuld is, zijn vortices energetisch voordeliger dan skyrmionen.



Figuur 5.1: Fasediagram in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  voor  $\Omega = 0$  bij constante chemische potentiaal. Er is een smalle strook waarbinnen skyrmionen energetisch voordeliger zijn dan vortices. Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. Bij  $\Omega = 0$  is de stabiele fase het condensaat zonder topologische excitatie. De hier aangeduide fases zijn dus metastabiel. De positie van huidige experimenten in ultrakoude kwantumgassen wordt aangeduid met een rood vierkantje [12] [16].

- Voorwaarde voor fasescheiding:  $\Omega_{int} < -1.17$

Elke waarde van  $\Omega_{int}$  in het fasediagram komt overeen met een reeks waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  waarvoor de componenten zich niet ontmengen ( $\gamma^2 < \beta$ ). Als deze voorwaarde vervuld is, bestaan er geen waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  waarvoor er geen fasescheiding plaatsvindt.

De laatste voorwaarde werd als volgt afgeleid. We zoeken de minimale of maximale waarde die  $\Omega_{int}$  kan aannemen als  $\gamma^2 > \beta$  (en dus als er geen fasescheiding plaatsvindt).  $\Omega_{int}$  wordt gegeven door (4.58).

$$\Omega_{int} = (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2}. \quad (5.11)$$

Voor  $\beta$  geldt  $\beta > 1$ . Verder hebben we geen restricties op  $\beta$  geplaatst. Voor  $\gamma$  geldt  $-\sqrt{\beta} < \gamma < \sqrt{\beta}$ .  $\Omega_{int}$  kan willekeurig groot worden, aangezien  $\beta$  willekeurig groot kan worden en de oplossing  $\gamma = 0$  altijd is toegelaten.  $\Omega_{int}$  is dus niet naar boven toe begrensd.  $\Omega_{int}$  is echter wel naar onder toe begrensd. De laagste waarde van  $\Omega_{int}$  bij een bepaalde waarde van  $\beta$  wordt gegeven door

$$\Omega_{int} = (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} + \left(-\sqrt{\beta} - 1\right) \frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2}, \quad (5.12)$$

waarbij  $\gamma = -\sqrt{\beta}$  werd gekozen. We zoeken nu het minimum van deze functie. Hiervoor stellen we de afgeleide van  $\Omega_{int}$  naar  $\beta$  gelijk aan nul.

$$0 = \frac{\partial \Omega_{int}}{\partial \beta} = \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} - \frac{1}{2\sqrt{\beta}} \frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2} \quad (5.13)$$

$$\Leftrightarrow \beta = \left(\frac{2 \ln 2 + 1}{4 \ln 2 - 1}\right)^2 \approx 1.81 \quad (5.14)$$

Dit komt overeen met  $\Omega_{int} = -1.17$ . Voor  $\Omega_{int} < -1.17$  zullen de componenten zich dus altijd ontmengen.

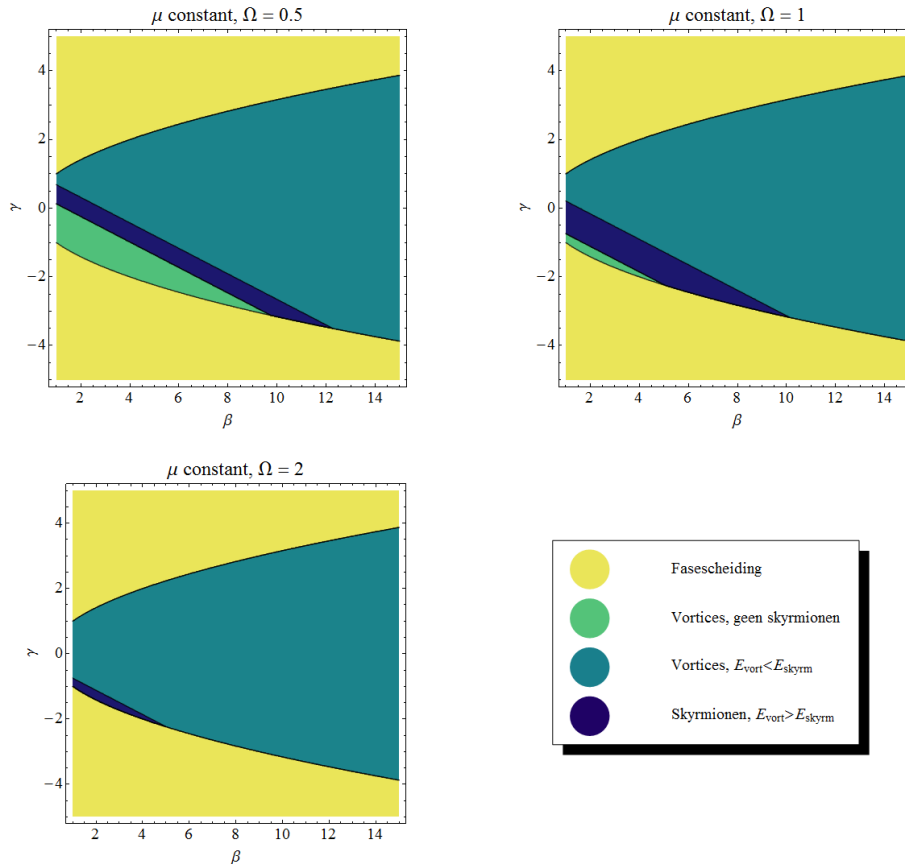
We kunnen nu opnieuw vier gebieden onderscheiden:

- $\Omega_{int} = -1.17$ : Fasescheiding. Voor alle waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  ontmengen de componenten zich. In de andere gebieden is de vermelde fase enkel geldig voor de waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  waarbij  $\gamma^2 < \beta$ .

- $\Omega_{int} < -\Omega$ : Skyrmionen zijn niet stabiel, zodat er enkel vortices gevormd kunnen worden.
- $\Omega_{int} > -\Omega$  en  $\Omega_{int} < 0.01 - 0.55\Omega$ : Skyrmionen zijn energetisch voordeliger dan vortices.
- $\Omega_{int} > 0.01 - 0.55\Omega$ : Vortices zijn energetisch voordeliger dan skyrmionen.

Ook hier moeten we de bedenking maken dat zolang  $\Omega < \Omega_{crit}$ , de stabiele fase een condensaat zonder topologische excitaties is.

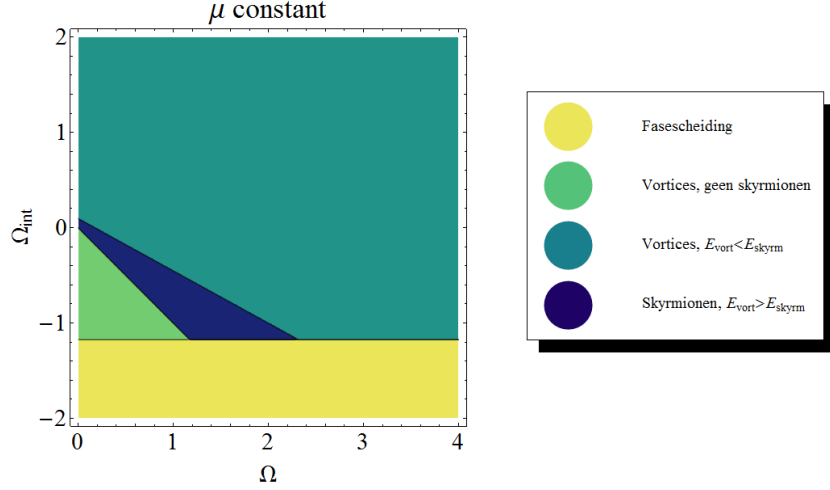
Het volledige fasediagram wordt weergegeven in figuur 5.3. Merk op dat de rechten die de grenzen bepalen van het skyrmionengebied in de fasediagrammen van figuren 5.1 en 5.2, overeenkomen met één punt in het fasediagram in figuur 5.3. Deze rechten in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  komen dus overeen met één waarde van  $\Omega_{int}$ .



Figuur 5.2: Fasediagrammen in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  voor  $\Omega = 0.5$ ,  $\Omega = 1$  en  $\Omega = 2$  bij constante chemische potentiaal. Er is een duidelijke strook waarbinnen skyrmionen energetisch voordeliger zijn dan vortices. Deze strook is breder voor  $\Omega = 1$  dan voor  $\Omega = 0$  en  $\Omega = 0.5$ , maar bevindt zich bij lagere waarden van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ . Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. Voor  $\Omega = 2$  begint het skyrmionengebied reeds te verdwijnen. Als  $\Omega < \Omega_{crit}$ , is de stabiele fase het condensaat zonder topologische excitatie. Pas als  $\Omega > \Omega_{crit}$  zijn de topologische fases aangeduid in deze diagrammen stabiel.

#### 5.1.4 Bespreking van de fasediagrammen

In figuren 5.1 t.e.m. 5.3 worden de verschillende fasediagrammen weergegeven. We zien duidelijk dat er slechts een beperkt gebied is waar de skyrmionoplossing energetisch voordeliger is dan de vortexoplossing. Verder vallen de omstandigheden waarbij skyrmionen experimenteel werden opgewekt binnen het gevonden geldigheidsgebied voor skyrmionen.



Figuur 5.3: Fasediagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$  bij constante chemische potentiaal. Er is een smalle strook waarbinnen skyrmionen stabiel zijn en energetisch voordeliger dan vortices. De grenzen van deze strook worden eerst breder naarmate  $\Omega$  stijgt en dan opnieuw smaller, tot de strook verdwijnt bij  $\Omega = 2.31$ . Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. Elk punt in het fasediagram correspondeert met een reeks waarden voor de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  waarvoor  $\gamma^2 < \beta$ . Voor  $\Omega_{int} < -1.17$  vindt er voor alle mogelijke waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  fasescheiding plaats. Of de topologische excitaties hierboven stabiel zijn ten opzichte van het condensaat zonder vortices of skyrmionen, hangt af van  $\Omega_{crit} = \frac{\ln(R^2)}{R^2}$ , en dus van de grootte van het condensaat. Pas wanneer  $\Omega > \Omega_{crit}$  zijn de topologische excitaties stabiel.

Of het voordelig is om een skyrmion te vormen, is sterk afhankelijk van de verhouding tussen de interactieconstanten. Als de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  en dus ook  $\Omega_{int}$  groot zijn, is een vortex energetisch voordeliger dan een skyrmion. Dit wordt veroorzaakt door het feit dat het in deze gevallen veel energie kost om de tweede component in de kern van het skyrmion te vormen. Hierdoor is het skyrmion noodzakelijk klein (en  $\alpha$  groot) en heeft het ook een hoge kinetische energie. Het verschil in kinetische energie door het verschil in grootte tussen een vortex en een skyrmion wordt weergegeven in de term  $\ln\left(\frac{\alpha_{vort}}{\alpha_{skyrm}}\right)$  in (5.6).

Als de interactieconstanten laag genoeg zijn, wordt het skyrmion van vergelijkbare grootte of groter dan een vortex. Dit verlaagt de kinetische energie van het skyrmion. Bovendien moeten we voor een vortex interactie energie betalen om het condensaat te vernietigen in de kern van de vortex, wat niet het geval is voor een skyrmion. Dit spreekt in het voordeel van het skyrmion. Hierdoor zal voor

$$\alpha_{skyrm} < \exp\left(-\frac{2 \ln 2 + 1}{3}\right) \alpha_{vort} \approx 0.67 \alpha_{vort} \quad (5.15)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\alpha_{skyrm}} > 1.49 \frac{1}{\alpha_{vort}} \quad (5.16)$$

het skyrmion energetisch voordeliger zijn dan een vortex, waarbij  $\frac{1}{\alpha}$  een maat is voor de grootte van de vortex of het skyrmion.

De maximale skyrmiongrootte wordt gegeven door  $\frac{1}{\alpha_{skyrm}}$  bij  $\Omega_{int} = -1.17$ , vooropgesteld dat de skyrmionoplossing nog bestaat voor  $\Omega_{int} = -1.17$  (en niet oneindig groot wordt). Als de skyrmionoplossing niet bestaat bij  $\Omega_{int} = -1.17$ , is de maximale grootte oneindig. Als  $\Omega$  groter wordt, daalt de maximale skyrmiongrootte.

$$\frac{1}{\alpha_{skyrm}} = \sqrt{\frac{1}{\max[2 \ln 2 (\Omega + \Omega_{int}), 0]}} \leq \sqrt{\frac{1}{\max[2 \ln 2 (\Omega - 1.17), 0]}} \quad (5.17)$$

Vanaf  $\Omega = 1.17$ , is  $\Omega$  zo groot dat er geen gebied meer is waar de skyrmionoplossing niet bestaat ( $\Omega_{int} > -1.17$  en  $\Omega = 1.17 > 0 \Rightarrow \Omega + \Omega_{int} > 0$ ). Voor  $\Omega = 2.31$  wordt de maximale skyrmiongrootte zo klein, dat een vortex altijd energetisch voordeliger is dan een skyrmion.

In figuur 5.3 wordt het fasediagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$  weergegeven. De ondergrens van het gebied wordt gegeven door de grens  $\Omega + \Omega_{int} = 0$ . De energie van het skyrmion wordt volledig bepaald door  $\Omega + \Omega_{int}$ . Als  $\Omega$  stijgt, wordt de vortex echter kleiner, waardoor de energie van de vortex stijgt als functie van  $\Omega$ . Bij grotere  $\Omega$  spreekt dit steeds meer in het voordeel van het skyrmion. Daardoor daalt de bovengrens van het skyrmiongebied minder steil dan de rechte  $\Omega + \Omega_{int} = 0$  en wordt het skyrmiongebied breder bij stijgende  $\Omega$ , tot het de grens bereikt van het gebied waar fasescheiding plaatsvindt.

## 5.2 Constant aantal deeltjes

### 5.2.1 Energieverschil

In deel 3.5 hebben we de energie van een vortex bij constante chemische potentiaal omgezet naar constant aantal deeltjes. Dit deden we door over te gaan naar het canonisch ensemble en onze dichtheid te hernormaliseren. Het resultaat wordt gegeven door

$$\begin{aligned} \frac{E_N^{vort}}{2\pi} &= F(\alpha R) \left[ \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) + 0.209505 \dots + \ln \alpha_{vort,N} + \ln R \right] \\ &+ \frac{F^2(\alpha R)}{2} \left( \frac{R^2}{2} - \frac{1}{\alpha_{vort,N}^2} \frac{8 \ln 2 + 1}{6} \right) - \Omega \frac{R^2}{2} \end{aligned} \quad (5.18)$$

met

$$F(\alpha R) = \left( \frac{\rho_0}{\rho_\infty} \right)^2 = \left[ 1 + \frac{2}{(\alpha R)^2} \ln [\cosh(\alpha R)] - \frac{2}{\alpha R} \tanh(\alpha R) \right]^{-1} \quad (5.19)$$

en

$$\alpha_{vort,N} = \sqrt{\frac{4 \ln 2 - 1}{6}} \quad (5.20)$$

voor grote  $R$ . We willen nu de vergelijking maken met de energie (5.3) van het skyrmion. Daarvoor moeten we  $E_{GP}^{skyrm}$  eerst omzetten van het grootcanonisch naar het canonisch ensemble. Dit doen we door bij  $E_{GP}^{skyrm} = E_{tot}^{skyrm} + E_0$  (met  $E_0 = -\frac{\pi R^2}{2}$ ) een term gelijk aan  $\mu N$  op te tellen. In onze dimensieloze eenheden wordt  $\mu N$  gegeven door  $\pi R^2$ . De canonische energie  $E_N^{skyrm}$  van een skyrmion wordt dus gegeven door

$$\begin{aligned} \frac{E_N^{skyrm}}{2\pi} &= \frac{E_{tot}^{skyrm} - \frac{\pi R^2}{2} + \pi R^2}{2\pi} \\ &= \ln 2 + \ln(\alpha_{skyrm}) + \ln(R) + 0.709505 \dots - \frac{\Omega R^2}{2} + \frac{R^2}{4} \end{aligned} \quad (5.21)$$

met

$$\alpha_{skyrm} = \sqrt{2 \ln 2\Omega + (\beta - 1) \frac{4 \ln 2 - 1}{6} + (\gamma - 1) \frac{2 \ln 2 + 1}{3}} \quad (5.22)$$

Merk op dat de waarde van de variationele parameter  $\alpha_{skyrm}$  geen invloed heeft op het totale aantal deeltjes. De skyrmion golf functie blijft dus hetzelfde voor constante chemische potentiaal als bij een constant aantal deeltjes. Dit betekent dat we voor het skyrmion geen extra hernormalisatie van de dichtheid moeten uitvoeren, zoals we voor de vortex wel hebben gedaan.

We kunnen nu  $E_N^{skyrms}$  en  $E_N^{vort}$  vergelijken.

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta E_N}{2\pi} &= \frac{E_N^{vort} - E_N^{skyrms}}{2\pi} \\
&= [F(\alpha_{vort,N}R) - 1] \left[ \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{6} \right) + 0.209505 \dots + \ln \alpha_{vort,N} + \ln R \right] \\
&\quad + [F^2(\alpha_{vort,N}R) - 1] \left( \frac{R^2}{4} - \frac{8 \ln 2 + 1}{8 \ln 2 - 2} \right) \\
&\quad - \left( \frac{2 \ln 2 + 1}{6} + \frac{12 \ln 2}{8 \ln 2 - 2} \right) + \ln \left( \frac{\alpha_{vort,N}}{\alpha_{skyrms}} \right)
\end{aligned} \tag{5.23}$$

We nemen nu de limiet  $R \rightarrow +\infty$ . Hierbij moeten we goed opletten met de term  $[F^2(\alpha_{vort,N}R) - 1] \frac{R^2}{4}$ , aangezien deze term in de limiet  $R \rightarrow +\infty$  toch nog een eindige bijdrage levert.

$$\begin{aligned}
\lim_{R \rightarrow +\infty} \left\{ [F^2(\alpha R) - 1] \frac{R^2}{4} \right\} &= \lim_{R \rightarrow +\infty} \left\{ \left[ \frac{1}{\left(1 - \frac{2 \ln 2}{\alpha^2 R^2}\right)^2} - 1 \right] \frac{R^2}{4} \right\} \\
&= \lim_{R \rightarrow +\infty} \left\{ \left[ \frac{1 - \left(1 - \frac{2 \ln 2}{\alpha^2 R^2}\right)^2}{\left(1 - \frac{2 \ln 2}{\alpha^2 R^2}\right)^2} \right] \frac{R^2}{4} \right\} \\
&= \lim_{R \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{4 \ln 2}{\alpha^2 R^2} \frac{R^2}{4} \right\} = \frac{\ln 2}{\alpha^2}
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Het energieverschil wordt voor grote condensaten dus benaderend gegeven door

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \frac{\Delta E_N}{2\pi} = - \left( \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right) + \ln \left( \frac{\alpha_{vort,N}}{\alpha_{skyrms}} \right) \tag{5.25}$$

Dit is van dezelfde vorm als de voorwaarde (5.6) bij constante chemische potentiaal. Het grote verschil is dat de grootte  $\alpha_{vort,N}$  van de vortex niet meer afhangt van  $\Omega$ , waardoor dit toch duidelijk andere fase diagrammen oplevert.

## 5.2.2 Opstellen van de fase diagrammen

We kunnen nu de fase diagrammen opstellen. We stellen opnieuw twee verschillende soorten fase diagrammen op: fase diagrammen in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  bij een vaste waarde van  $\Omega$  en een fase diagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$ . De stabiliteitsvoorwaarde voor het skyrmion blijft hetzelfde in beide regimes:  $\gamma > 1.37 - 0.37\beta - 1.74\Omega$  of  $\Omega_{int} > -\Omega$ . Ook de voorwaarde voor fasescheiding verandert niet:  $\gamma^2 > \beta$  of  $\Omega_{int} < -1.17$ . De voorwaarde  $\Delta E_N < 0$  ( $E_N^{vort} < E_N^{skyrms}$ ) wordt nu echter gegeven door

$$\gamma < \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{4 \ln 2 + 2} \right) \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) + \left( \frac{8 \ln 2 + 1}{4 \ln 2 + 2} \right) - \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{4 \ln 2 + 2} \right) \beta - \frac{6 \ln 2}{2 \ln 2 + 1} \Omega \tag{5.26}$$

$$\Leftrightarrow \gamma < 1.54 - 0.37\beta - 1.74\Omega \tag{5.27}$$

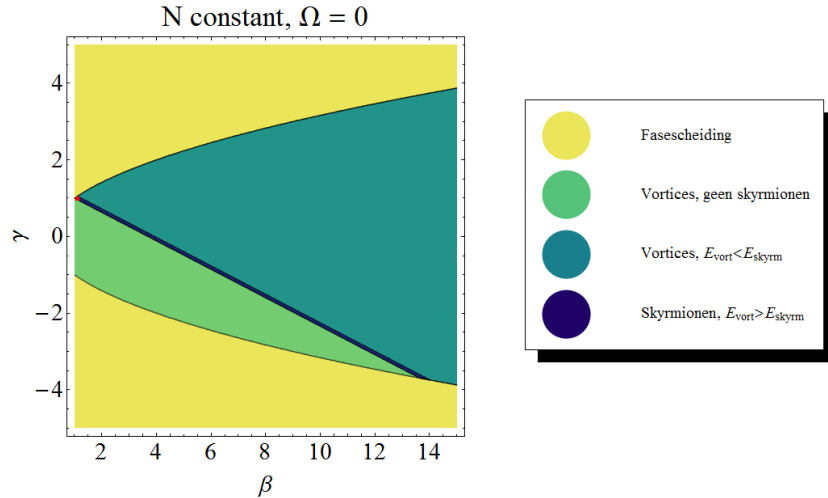
in functie van  $\gamma$ ,  $\beta$  en  $\Omega$  en

$$\Omega_{int} < \frac{4 \ln 2 - 1}{12 \ln 2} \exp \left( -\frac{2 \ln 2 + 1}{3} \right) - \Omega \tag{5.28}$$

$$\Leftrightarrow \Omega_{int} < 0.10 - \Omega \tag{5.29}$$

in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$ . Het valt op dat de rechten die de grens  $\Delta E_N = 0$  bepalen dezelfde coëfficiënt voor  $\Omega$  hebben als de stabiliteitsvoorwaarde. Dit wil zeggen dat de breedte van het gebied waar het skyrmion energetisch voordeliger is dan de vortex niet zal veranderen in functie van  $\Omega$ , wat duidelijk wel het geval is bij constante chemische potentiaal. De andere coëfficiënten zijn hetzelfde voor beide regimes. De voorwaarden bepalen opnieuw samen vier gebieden, analoog aan het geval bij constante chemische potentiaal.





Figuur 5.4: Fasediagram in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  voor  $\Omega = 0$  bij constant aantal deeltjes. Er is een smalle strook waarbinnen skyrmionen stabiel zijn en energetisch voordeliger dan vortices. Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. De positie van huidige experimenten in ultrakoude kwantumgassen wordt aangeduid met een rood vierkantje [12] [16].

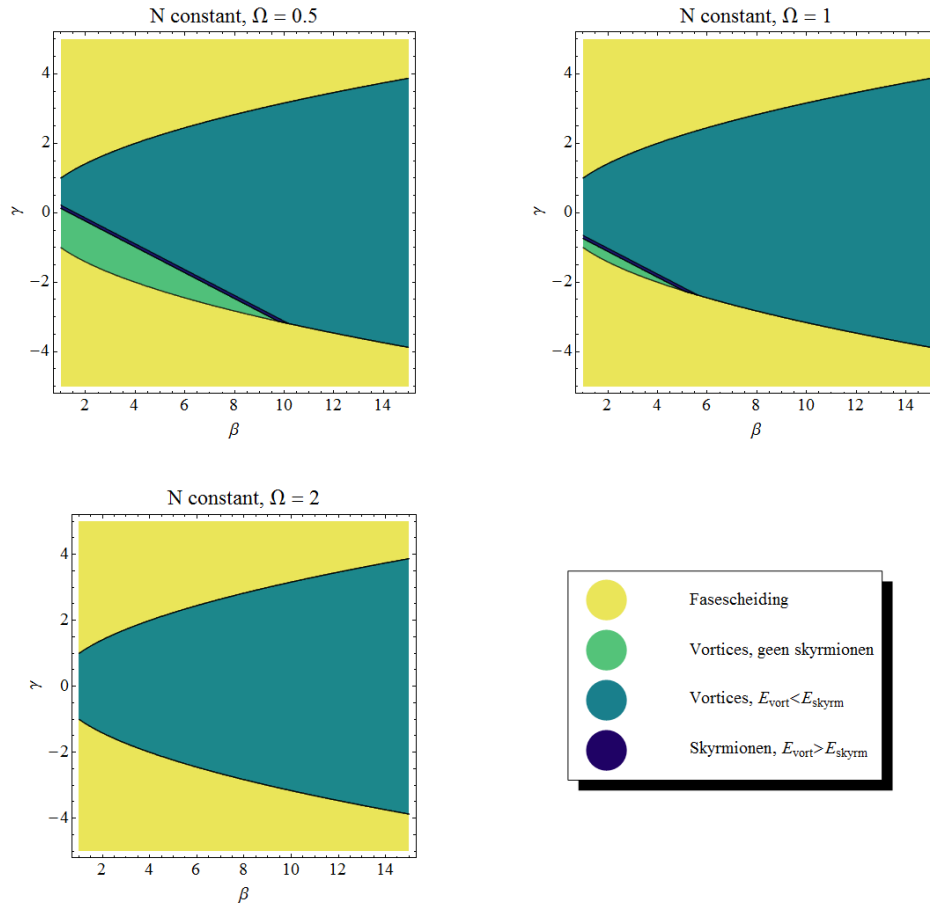
### 5.2.3 Bespreking van de fasediagrammen

De fasediagrammen in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  worden weergegeven in figuren 5.4 en 5.5. Het fasediagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$  wordt weergegeven in figuur 5.6. We vinden gelijkaardige trends terug als bij constante chemische potentiaal, met als grote verschil dat de breedte van het skyrmiongebied constant blijft. Dit is te wijten aan het feit dat de vortexgrootte bij constant aantal deeltjes constant blijft als functie van  $\Omega$ . Het energieverval (5.23) wordt volledig bepaald door de verhouding tussen de grootte van de vortex en de grootte van het skyrmion. Hierdoor hangt het energieverval enkel af van de grootte van het skyrmion en dus van  $\Omega + \Omega_{int}$ . De grenzen tussen de gebieden worden bepaald door rechten bij constante  $\Omega + \Omega_{int}$ . De grenzen in de fasediagrammen in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  (bij vaste  $\Omega$ ) komen overeen met één punt in het fasediagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$ .

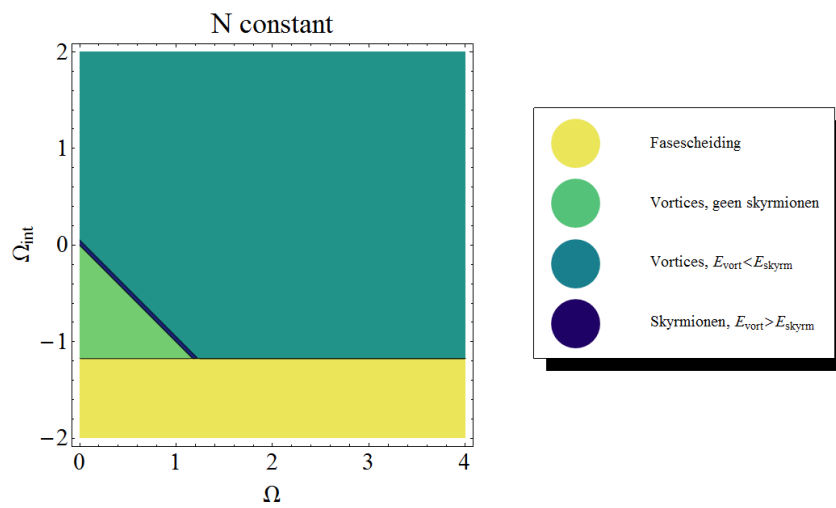
Hoe groter het skyrmion, hoe energetisch voordeliger het skyrmion. Hierdoor is het skyrmion energetisch voordeliger dan de vortex bij lage interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  en lage  $\Omega$ , zolang deze waarden niet zo laag zijn dat het skyrmion onstabiel wordt. Dit heeft ook tot gevolg dat naarmate  $\Omega$  toeneemt, het skyrmiongebied zich bij lagere waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  zal bevinden. Dit is duidelijk zichtbaar in de verschillende fasediagrammen.

Als  $\Omega$  toeneemt, neemt de maximale waarde van  $\alpha_{skyrm}$  af. Deze maximale waarde is bepaald door de voorwaarde dat vanaf  $\gamma^2 > \beta$  fasescheiding plaatsvindt en er dus geen geldige skyrmionoplossing mogelijk is. Vanaf  $\Omega = 1.17$  bestaat de skyrmionoplossing voor alle mogelijke waarden van  $\Omega_{int}$  ( $\Omega_{int} > -1.17$ ). Dit is dezelfde waarde die we eerder vonden bij constante chemische potentiaal. Vanaf  $\Omega = 1.27$  is de maximale grootte van het skyrmion zo klein dat de vortex altijd energetisch voordeliger is. Deze waarde is kleiner dan de waarde die we terugvonden bij constante chemische potentiaal. Het verschil wordt veroorzaakt door het feit dat de grootte van de vortex constant is bij constant aantal deeltjes. Bij constante chemische potentiaal neemt de grootte van de vortex eveneens af als  $\Omega$  stijgt, alleen minder snel dan de skyrmiongrootte. Hierdoor wordt de energie van de vortex groter, wat het gebied waarin het skyrmion energetisch voordelig is groter maakt. Bij constant aantal deeltjes is de vortexgrootte constant, waardoor we dit effect niet terugvinden en het skyrmiongebied even groot blijft.

Voor de topologische fases die we zonet hebben besproken, geldt opnieuw dat deze enkel stabiel zullen zijn voor  $\Omega > \Omega_{crit} = \frac{\ln(R^2)}{R^2}$ . Als  $\Omega < \Omega_{crit}$  is het energetisch voordeliger om een condensaat zonder topologische excitaties te vormen en zijn de topologische fases metastabiel.



Figuur 5.5: Fasediagrammen in functie van  $\beta$  en  $\gamma$  voor  $\Omega = 0.5$ ,  $\Omega = 1$  en  $\Omega = 2$  bij constant aantal deeltjes. Er is een duidelijke strook waarbinnen skyrmionen energetisch voordeliger zijn dan vortices. Deze strook is breder voor  $\Omega = 1$  dan voor  $\Omega = 0$  en  $\Omega = 0.5$ , maar bevindt zich bij lagere waarden van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ . Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. Voor  $\Omega = 2$  is er geen gebied meer waar het skyrmion energetisch voordeliger is dan de vortex. Als  $\Omega < \Omega_{crit}$ , is de stabiele fase het condensaat zonder topologische excitatie. Pas als  $\Omega > \Omega_{crit}$  zijn de topologische fases aangeduid in deze diagrammen stabiel.



Figuur 5.6: Fasediagram in functie van  $\Omega$  en  $\Omega_{int}$  bij constant aantal deeltjes. Er is een smalle strook waarbinnen skyrmionen energetisch voordeliger zijn dan vortices. De grenzen van deze strook zijn evenwijdig, zodat de zone even breed blijft voor alle waarden van  $\Omega$ . Daarbuiten domineren vortices of vindt er fasescheiding plaats. Elk punt in het fasediagram correspondeert met een reeks waarden voor de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  waarvoor  $\gamma^2 < \beta$ . Voor  $\Omega_{int} < -1.17$  vindt er voor alle mogelijke waarden van  $\beta$  en  $\gamma$  fasescheiding plaats.



## Hoofdstuk 6

# Creëren van een skyrmion

Een belangrijke eigenschap van een topologische excitatie is dat we deze niet kunnen creëren of vernietigen door een continue vervorming van de ruimte. We kunnen deze dus niet 'uit het niets' in het midden van een condensaat vormen, maar we moeten topologische excitaties van buiten het condensaat naar binnen brengen.

Bij een vortex is duidelijk te illustreren dat deze niet zomaar in het midden van een ééncomponentenscondensaat gecreëerd kan worden. De reden hiervoor is dat de fase van de golf functie slechts kan variëren van 0 tot  $2\pi$  en deze fase continu moet blijven. Als we een willekeurige lus  $C$  rond de vortex beschouwen, moet de fase in begin- en eindpunt gelijk blijven. Hierdoor kunnen we het aantal keren dat de fase met  $2\pi$  verandert bij het doorlopen van de lus niet veranderen, tenzij we de lus breken. Bij een tweecomponentenscondensaat geldt hetzelfde, maar in dat geval moeten we de totale fase  $\theta_T$  variëren om een vortex te vormen. De enige manier om een vortex in een condensaat binnen te brengen, is door de vortexlijn (waarlangs het condensaat vernietigd wordt en waarrond het condensaat roteert) van buiten het condensaat naar binnen te trekken.

Een skyrmion kunnen we op dezelfde wijze binnenbrengen, door de "skyrmionlijn" van buiten het condensaat naar binnen te trekken. Bij een skyrmion zijn er echter twee hoeken die we kunnen variëren: de menghoek  $\alpha_{mix}$  en de relatieve fase  $\phi$ , die samen de pseudospin vector bepalen. We onderzoeken nu of we deze extra vrijheidsgraad kunnen gebruiken om een skyrmion op een andere manier te vormen, via een verplooiing van de pseudospin vector die we vanaf de rand naar binnen brengen.

### 6.1 Beschrijving

We willen een excitatie vormen waarvan de relatieve fase met een geheel veelvoud van  $2\pi$  verandert langs elke lus  $C$  rond het skyrmion. Hiervoor zullen we de fasehoek  $\alpha_{mix}$  en de relatieve fase  $\phi$  variëren, wat equivalent is met een rotatie van de pseudospin. We starten vanaf een homogeen condensaat van één van de twee componenten. In dat geval zijn alle pseudospins omhoog of omlaag gericht,  $\mathbf{S} = \pm \mathbf{e}_z$ . Aan de rand van het condensaat trekken we de spin omlaag of omhoog tot  $\mathbf{S} = \mp \mathbf{e}_z$ . Dit 'omhoog of omhoog trekken' is equivalent met het variëren van  $\alpha_{mix}$ . Terwijl we deze pseudospin verdraaien, zullen de omringende spins ook gedeeltelijk meegetrokken worden door de interactie tussen de spins (beschreven door de term evenredig met  $(\nabla \mathbf{S})^2$  in de Gross-Pitaevskii energiefunctie). Hierdoor zal de vervorming die we aan de rand creëren naar binnen getrokken worden (zie figuur 6.1). Omdat we starten met een homogeen ééncomponentenscondensaat, kunnen we de fasehoek  $\phi$  kiezen waarlangs de spin verdraaid wordt. Zo kunnen we rotatie in het systeem binnenbrengen. We gaan uit van de meest eenvoudige continue overgang, waarbij we de keuze  $\phi = -\varphi$  maken (met  $\phi$  de relatieve fase en  $\varphi$  de poolhoek van de cilindercoördinaten waarmee we de positie beschrijven). Bij deze keuze maken we gebruik van de onbepaaldheid van  $\phi$  voor een ééncomponentenscondensaat. In dat geval ligt de fase van deze component vast en daardoor ook de totale fase  $\theta_T$ :

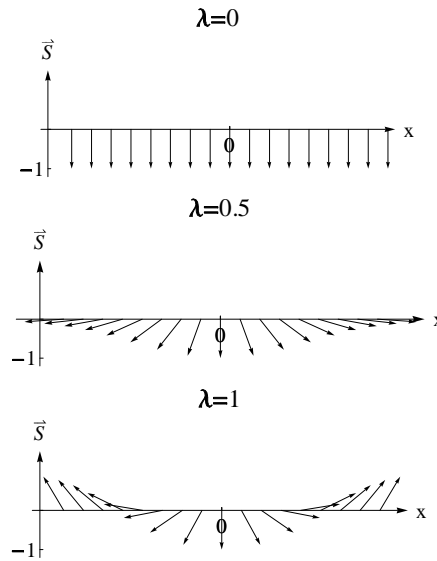
$$\begin{cases} \psi_1 = f_1 \exp[i\theta_1] = f_1 \exp\left[i\left(\theta_T - \frac{\phi}{2}\right)\right] \\ \psi_2 = f_2 \exp[i\theta_2] = f_2 \exp\left[i\left(\theta_T + \frac{\phi}{2}\right)\right] \end{cases} \quad (6.1)$$

We gaan er zonder verlies van algemeenheid van uit dat, ver van de kern van het skyrmion, component 1 dominant is in de eindtoestand van het gevormde skyrmion. We starten dus met een homogeen, stilstaand

condensaat van de tweede component. Hierbij is  $\theta_2 = 0$ , zodat  $\theta_T + \frac{\phi}{2} = 0$ . We kunnen deze toestand dus beschrijven aan de hand van  $\theta_T = 0$  en  $\phi = 0$ , wat de meest intuïtieve beschrijving is, of via  $\theta_T = \frac{\varphi}{2}$  en  $\phi = -\varphi$  (of andere analoge beschrijvingen). Beide keuzen voor  $\theta_T$  en  $\phi$  beschrijven dezelfde golf functie, maar de laatste laat ons toe het pseudospin patroon van het skyrmion te creëren. Verder komt dit overeen met de waarden voor  $\theta_T$  en  $\varphi$  die we eerder hebben gebruikt om het skyrmion te beschrijven in hoofdstuk 4.

Wat we in feite zonet hebben beschreven, kunnen we nu vertalen in termen van de componenten van het condensaat. We starten vanaf een stilstaand homogeen condensaat van één van de twee componenten. Vervolgens zetten we deze component om in de andere component volgens het specifieke patroon van het skyrmion. In de reeds aanwezige component kunnen we via een continue overgang geen extra rotatie introduceren, maar wel in de component die we vormen. We zorgen er dus voor dat de component die we vormen wel roteert rond de kern van het te vormen skyrmion. Deze roterende component brengen we dus vanaf de rand toe naar binnen, tot we de structuur van een skyrmion bekomen.

We onderzoeken nu of de energie continu blijft bij deze overgang vanuit een homogeen condensaat van de tweede component met uniforme dichtheid.



Figuur 6.1: Creatie van een skyrmion. We starten vanuit een homogeen tweecomponentscondensaat ( $\mathbf{S} = -\mathbf{e}_z$ ) en verdraaien de pseudospin vanaf de rand omhoog, tot we de pseudospintextuur van een skyrmion bekomen.

## 6.2 Energie bij overgang vanaf $S_z = -1$

We onderzoeken of de energie van het systeem continu blijft wanneer we een skyrmion creëren vanuit een stilstaand, uniform, homogeen condensaat van de tweede component ( $\mathbf{S} = -\mathbf{e}_z$ ) op de wijze die we in voorgaande sectie hebben beschreven (zie figuur 6.1). Deze transformatie kunnen we mathematisch beschrijven via

$$f = 1 \tag{6.2}$$

$$\theta_T = \frac{\varphi}{2} \tag{6.3}$$

$$\phi = -\varphi \tag{6.4}$$

$$\begin{aligned} \cos(\alpha_{mix}) &= -1 + \lambda \left[ 1 + \cos(\alpha_{mix}^{skyrm}) \right] \\ &= 2\lambda \tanh^2(\alpha r) - 1 \end{aligned} \tag{6.5}$$

waarbij  $\cos(\alpha_{mix}^{skyr})$  gegeven wordt door de waarde van  $\alpha_{mix}$  voor het eerder teruggevonden skyrmion uit (4.26) en de variationele parameter  $\lambda$  kan variëren tussen 0 en 1. Als  $\lambda = 0$ , is  $\cos(\alpha_{mix}) = -1$ . Dit beschrijft de beginsituatie, waarbij alle spins omlaag gericht zijn. Als  $\lambda = 1$ , is  $\cos(\alpha_{mix}) = \cos(\alpha_{mix}^{skyr})$ . Dit komt overeen met het pseudospin patroon van een skyrmion. Uit onze keuze voor  $\cos(\alpha_{mix})$  kunnen we ook  $\sin(\alpha_{mix})$  berekenen.

$$\sin(\alpha_{mix}) = \sqrt{1 - \cos^2(\alpha_{mix})} = 2 \tanh(\alpha r) \sqrt{\lambda(1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))} \quad (6.6)$$

De pseudospin wordt dan gegeven door

$$\begin{cases} S_x = 2 \tanh(\alpha r) \sqrt{\lambda(1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))} \cos \varphi \\ S_y = -2 \tanh(\alpha r) \sqrt{\lambda(1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))} \sin \varphi \\ S_z = 2\lambda \tanh^2(\alpha r) - 1 \end{cases} \quad (6.7)$$

Het snelheidsveld wordt gegeven door

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \nabla \theta_T - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}] \nabla \phi = \frac{\lambda \tanh^2(\alpha r)}{r} \mathbf{e}_\varphi \quad (6.8)$$

We hebben nu alles wat we nodig hebben om de verschillende termen die bijdragen tot de energie (4.15) te berekenen.

$$E_{GP} = 2\pi \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{ps} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{magn} + \mathcal{E}_{rot} + \mathcal{E}_R \} \quad (6.9)$$

De bijdrage van de kwantumdruk is nul ( $\mathcal{E}_{qp} = 0$ ), aangezien de totale dichtheid constant blijft ( $f = 1$ ). De overige termen berekenen we apart.

### Pseudospin bijdrage

De bijdrage van de pseudospin-druk wordt gegeven door

$$\mathcal{E}_{ps} = \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 = \frac{1}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 \quad (6.10)$$

Het kwadraat van de pseudospin gradiënt rekenen we uit via (4.31). Na enig rekenwerk levert dit

$$\mathcal{E}_{ps} = \frac{\lambda \alpha^2}{\cosh^2(\alpha r)} \left[ \frac{1 - \tanh^2(\alpha r)}{1 - \lambda \tanh^2(\alpha r)} \right] + \frac{\lambda \tanh^2(\alpha r) (1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))}{r^2} \quad (6.11)$$

Voor  $\lambda = 0$  is deze bijdrage nul. Dit is logisch, aangezien een homogeen ééncomponentenscondensaat geen pseudospingradiënt heeft. Voor  $\lambda = 1$  wordt deze bijdrage gelijk aan de bijdrage die we in (4.32) vonden voor het skyrmion. Om de volledige bijdrage tot de energie te berekenen, moeten we nog integreren over het oppervlak van het cilindrische condensaat.

$$\frac{E_{ps}}{2\pi} = \int_0^{\alpha R} x dx \left\{ \frac{\lambda}{\cosh^2 x} \left[ \frac{1 - \tanh^2 x}{1 - \lambda \tanh^2 x} \right] + \frac{\lambda \tanh^2 x (1 - \lambda \tanh^2 x)}{x^2} \right\} \quad (6.12)$$

De eerste term convergeert, maar is niet exact uitwerkbaar. In de tweede term moeten we een logaritmische divergentie voor  $R \rightarrow +\infty$  verwijderen. Dit levert

$$\begin{aligned} \frac{E_{ps}}{2\pi} &= \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{\lambda}{\cosh^2 x} \left[ \frac{1 - \tanh^2 x}{1 - \lambda \tanh^2 x} \right] \right\} + \lambda^2 0.384928 \dots \\ &+ \lambda(1 - \lambda) [0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R] \end{aligned} \quad (6.13)$$

## Kinetische energie

De bijdrage tot de kinetische energie wordt gegeven door

$$\mathcal{E}_{kin} = f^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 = \frac{\lambda^2 \tanh^4(\alpha r)}{r^2} \quad (6.14)$$

De kinetische energie van het systeem wordt dus gegeven door

$$\begin{aligned} \frac{E_{kin}}{2\pi} &= \lambda^2 \int_0^{\alpha R} x dx \left\{ \frac{\tanh^4 x}{x^2} \right\} = \lambda^2 \frac{E_{kin}^{skyrion}[\alpha]}{2\pi} \\ &= \lambda^2 [\ln \alpha + \ln R + 0.209505 \dots - 0.384928 \dots] \end{aligned} \quad (6.15)$$

Als we  $\lambda$  doen toenemen en het skyrmion vormen, neemt de kinetische energie toe. Dit komt omdat er steeds meer roterend condensaat wordt aangemaakt.

## Interactie energie

De interactie energie bestaat uit twee bijdragen:  $\mathcal{E}_{int}$  en  $\mathcal{E}_{magn}$ . We rekenen elke bijdrage apart uit. In  $\mathcal{E}_{int}$  hebben we gebruik gemaakt van de bulkwaarde  $\mu = 1$  van de chemische potentiaal.

$$\mathcal{E}_{int} = -\mu f^2 + \frac{1}{2} f^4 = -\frac{1}{2} \quad (6.16)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{magn} &= -\frac{f^4}{2} \left[ \frac{(1-\beta)}{4} (S_z - 1)^2 + \frac{(1-\gamma)}{2} (1 - S_z^2) \right] \\ &= \left[ \frac{(\beta-1)}{2} (\lambda \tanh^2(\alpha r) - 1)^2 + (\gamma-1) \lambda \tanh^2(\alpha r) (1 - \lambda \tanh^2(\alpha r)) \right] \end{aligned} \quad (6.17)$$

Deze uitdrukkingen gebruiken we om de interactie energie te berekenen, waarbij we reeds de interactie energie van een homogeen condensaat van de eerste component van de energie hebben afgetrokken.

$$\begin{aligned} \frac{E_{int}}{2\pi} &= \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{magn} \} - \int_0^R r dr \left\{ -\frac{1}{2} \right\} \\ &= -\frac{1}{\alpha^2} \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} \int_0^{\alpha R} x dx [(\lambda \tanh^2 x - 1)^2] + (\gamma-1) \int_0^{\alpha R} x dx [\lambda \tanh^2 x (1 - \lambda \tanh^2 x)] \right\} \end{aligned} \quad (6.18)$$

We werken de integralen uit op dezelfde wijze als de integralen in sectie 4.3, waarbij we de divergenties voor  $R \rightarrow +\infty$  isoleren en de overige, convergerende integralen uitwerken in de limiet  $R \rightarrow +\infty$ . Dit levert

$$\begin{aligned} \frac{E_{int}}{2\pi} &= (1-\lambda) \left[ (1-\lambda) \frac{(\beta-1)}{2} + \lambda(\gamma-1) \right] \frac{R^2}{2} \\ &+ \frac{\lambda}{\alpha^2} \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} \left( \frac{(12-8\lambda) \ln 2 - \lambda}{6} \right) + (\gamma-1) \left( \frac{(8\lambda-6) \ln 2 + 1}{6} \right) \right\} \end{aligned} \quad (6.19)$$

Voor  $\lambda = 0$  wordt dit de interactie energie van een homogeen condensaat van de tweede component,

$$\frac{E_{int}(\lambda=0)}{2\pi} = \frac{(\beta-1)}{2} \frac{R^2}{2} \quad (6.20)$$

Voor  $\lambda = 1$  wordt dit de interactie energie van het skyrmion, zoals we eerder berekenden in (4.45).



### Rotatie energie

De rotatie energie wordt gegeven door

$$\begin{aligned} \frac{E_{rot}}{2\pi} &= \int_0^R r dr \mathcal{E}_{rot} = \int_0^R r dr \{-\Omega \lambda \tanh^2(\alpha r)\} \\ &= \lambda \frac{E_{rot}^{skym}(\alpha)}{2\pi} = \lambda \Omega \left[ -\frac{R^2}{2} + \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right] \end{aligned} \quad (6.21)$$

Als  $\Omega$  toeneemt zal de rotatie energie dalen, aangezien er steeds meer roterende component 1 wordt aangemaakt en de rotatie energie de energiewinst weergeeft die we maken door het condensaat te laten roteren.

### Koppelingsenergie

Ter controle hebben we hier ook de bijdrage van de koppelingsenergie berekend.

$$\mathcal{E}_R = -\omega_R f^2 S_x = -\omega_R 2 \tanh(\alpha r) \sqrt{\lambda(1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))} \cos \varphi \quad (6.22)$$

Vervolgens integreren we deze bijdrage om de koppelingsenergie te bekomen.

$$E_R = -\omega_R \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \left\{ 2 \tanh(\alpha r) \sqrt{\lambda(1 - \lambda \tanh^2(\alpha r))} \cos \varphi \right\} \quad (6.23)$$

Deze bijdrage is nul, aangezien  $\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi = 0$ .

#### 6.2.1 Totale energie

We kunnen nu alle termen samenvoegen. Van de termen die convergent zijn voor  $R \rightarrow +\infty$  gebruiken we de waarde voor  $R \rightarrow +\infty$ .

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}}{2\pi} &= \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{\lambda}{\cosh^2 x} \left[ \frac{1 - \tanh^2 x}{1 - \lambda \tanh^2 x} \right] \right\} + \lambda [\ln \alpha + \ln R + 0.209505 \dots] \\ &+ \frac{\lambda}{\alpha^2} \left\{ \frac{(\beta - 1)}{2} \left( \frac{(12 - 8\lambda) \ln 2 - \lambda}{6} \right) + (\gamma - 1) \left( \frac{(8\lambda - 6) \ln 2 + 1}{6} \right) \right\} \\ &+ (1 - \lambda) \left[ (1 - \lambda) \frac{(\beta - 1)}{2} + \lambda (\gamma - 1) \right] \frac{R^2}{2} + \lambda \Omega \left[ -\frac{R^2}{2} + \frac{\ln 2}{\alpha^2} \right] \end{aligned} \quad (6.24)$$

Om de waarde van  $\alpha$  te vinden, moeten we  $\frac{E_{tot}}{2\pi}$  minimaliseren naar  $\alpha$ .

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \frac{E_{tot}}{2\pi} \right) \\ &= \frac{\lambda}{\alpha} - \frac{2\lambda}{\alpha^3} \left\{ \Omega \ln 2 + \frac{(\beta - 1)}{2} \left( \frac{(12 - 8\lambda) \ln 2 - \lambda}{6} \right) + (\gamma - 1) \left( \frac{(8\lambda - 6) \ln 2 + 1}{6} \right) \right\} \\ \Leftrightarrow \alpha_{\min}^2 &= \left\{ \Omega 2 \ln 2 + (\beta - 1) \left( \frac{(12 - 8\lambda) \ln 2 - \lambda}{6} \right) + (\gamma - 1) \left( \frac{(8\lambda - 6) \ln 2 + 1}{3} \right) \right\} \\ &= \left\{ \alpha_{skym}^2 + (1 - \lambda) \left[ (\beta - 1) \left( \frac{8 \ln 2 + 1}{6} \right) - (\gamma - 1) \frac{8 \ln 2}{3} \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.25)$$

Voor  $\lambda = 0$  is  $\alpha$  onbepaald, aangezien we in dat geval niet kunnen spreken van een skyrmion, laat staan van een skyrmiongrootte. Voor  $\lambda = 1$  vinden we zoals verwacht de waarde voor het skyrmion terug. Als we  $\lambda$  van 0 naar 1 laten toenemen, zorgt de term evenredig met  $(\beta - 1)$  ervoor dat  $\alpha$  afneemt (en dus de grootte van het skyrmion toeneemt). De term met  $(\gamma - 1)$  draagt bij tot een toename van  $\alpha$  (en dus een afname

van de skyrmiongrootte) als  $\gamma > 1$  en heeft het omgekeerde effect als  $\gamma < 1$ . Welke term de overhand heeft, hangt af van de precieze waarde van  $\beta$  en  $\gamma$ . We hebben ook een nieuwe stabiliteitsvoorwaarde:

$$\Omega 2 \ln 2 + (\beta - 1) \left( \frac{(12 - 8\lambda) \ln 2 - \lambda}{6} \right) + (\gamma - 1) \left( \frac{(8\lambda - 6) \ln 2 + 1}{3} \right) > 0 \quad (6.26)$$

$$\Leftrightarrow \Omega > \left( \frac{8\lambda \ln 2 - \lambda + 2}{12 \ln 2} \right) - \beta \left( \frac{(12 - 8\lambda) \ln 2 - \lambda}{12 \ln 2} \right) - \gamma \left( \frac{(8\lambda - 6) \ln 2 + 1}{6 \ln 2} \right) \quad (6.27)$$

Bij  $\lambda = 0$  wordt de voorwaarde gegeven door

$$\begin{aligned} \Omega &> \frac{1}{6 \ln 2} - \beta - \gamma \left( \frac{-6 \ln 2 + 1}{6 \ln 2} \right) \\ &> 0.24 - \beta + 0.76\gamma \end{aligned} \quad (6.28)$$

Deze voorwaarde is altijd voldaan voor de waarden van de interactieparameters  $\beta$  en  $\gamma$  en de rotatiefrequentie  $\Omega$  waarbij het skyrmion stabiel is. In de meeste gevallen zal de nieuwe stabiliteitsvoorwaarde dus geen problemen opleveren.

We kunnen nu de waarde (6.25) van  $\alpha_{\min}$  opnieuw invullen in (6.24).

$$\begin{aligned} \frac{E_{tot}}{2\pi} &= \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{\lambda}{\cosh^2 x} \left[ \frac{1 - \tanh^2 x}{1 - \lambda \tanh^2 x} \right] \right\} \\ &+ \lambda [\ln \alpha_{\min} + \ln R + 0.209505 \dots] \\ &+ \frac{\lambda}{2} + (1 - \lambda) \left[ (1 - \lambda) \frac{(\beta - 1)}{2} + \lambda(\gamma - 1) \right] \frac{R^2}{2} - \lambda \Omega \frac{R^2}{2} \end{aligned} \quad (6.29)$$

We zien dat de energie sterk afhangt van de grootte van het condensaat. Dit is logisch: het omzetten van condensaat van de ene naar de andere component veroorzaakt een energieverval dat afhangt van de hoeveelheid condensaat die omgezet moet worden. Verder hangt ook het verschil in de kinetische energie en de rotatie energie af van  $R$ . De termen evenredig met  $\frac{R^2}{2}$  domineren dan ook het energieverloop in een groot condensaat, tenzij  $(\beta - 1)$ ,  $(\gamma - 1)$  en  $\Omega$  tegelijk nul zijn (of bijna nul). Reeds voor  $R = 100$  bij  $\beta = 1.01$ ,  $\gamma = 1.01$  en  $\Omega = 0$  zullen deze termen het volledige energieverloop domineren. Om het energieminimum te bepalen, maken we dus de benadering

$$\frac{E_{tot}}{2\pi} \approx (1 - \lambda) \left[ (1 - \lambda) \frac{(\beta - 1)}{2} + \lambda(\gamma - 1) \right] \frac{R^2}{2} - \lambda \Omega \frac{R^2}{2} \quad (6.30)$$

Dit is slechts een ruwe afchatting, maar dit levert wel goede kwalitatieve resultaten zolang  $(\beta - 1)$ ,  $(\gamma - 1)$  en  $\Omega$  niet tegelijk nul zijn. Merk op dat de andere termen nog een rol spelen in de bepaling van de uiteindelijke waarde van de energie en in het bepalen van de kritische rotatiefrequentie van het skyrmion. In onze benadering is de energie een kwadratische functie van  $\lambda$ .

$$\frac{4}{R^2} \frac{E_{tot}}{2\pi} \approx (\beta - 2\gamma + 1) \left[ \lambda + \frac{(\gamma - \beta - \Omega)}{(\beta - 2\gamma + 1)} \right]^2 + (\beta - 1) - \frac{(\gamma - \beta - \Omega)^2}{(\beta - 2\gamma + 1)} \quad (6.31)$$

Het minimum of maximum van de parabool bevindt zich bij

$$\lambda_0 = \frac{(\Omega + \beta - \gamma)}{(\beta - 2\gamma + 1)} \quad (6.32)$$

De teller is groter dan of gelijk aan nul. Dit leiden we af uit  $\beta > 1$ ,  $\Omega > 0$  en  $\gamma^2 < \beta$  (anders ontmengen de componenten zich). De noemer kan wel negatief zijn. We onderscheiden dus drie belangrijke gevallen:

1.  $(\beta - 2\gamma + 1) < 0 \Leftrightarrow \gamma > \frac{(\beta+1)}{2}$ : De energie is gegeven door een bergparabool.  $\lambda_0$  is een maximum en  $\lambda_0 < 0$ , zodat de energie monotoon daalt in het interval  $\lambda \in [0, 1]$ . Een voorbeeld van dit geval wordt weergegeven in figuur 6.2.

2.  $(\beta - 2\gamma + 1) = 0 \Leftrightarrow \gamma = \frac{(\beta+1)}{2}$ : De energie is constant als functie van  $\lambda$ . Het skyrmion heeft evenveel energie als een homogeen condensaat van de tweede component.
3.  $(\beta - 2\gamma + 1) > 0 \Leftrightarrow \gamma < \frac{(\beta+1)}{2}$ : De energie is gegeven door een dalparabool.  $\lambda_0$  is een minimum en  $\lambda_0 > 0$ .

In het eerste geval is de energie een monotoon dalende functie van  $\lambda$  en is het skyrmion de toestand met de laagste energie. Om het skyrmion te vormen, moeten we dus enkel de energie betalen die nodig is om alle pseudospins van het condensaat omlaag te richten (vanuit een homogeen condensaat met de pseudospins omhoog gericht):

$$\Delta E = (\beta - 1) \frac{\pi R^2}{2} \quad (6.33)$$

Merk op dat het skyrmion enkel stabiel kan zijn als de rotatiefrequentie groter is dan de kritische rotatiefrequentie. Als dit niet het geval is heeft een homogeen condensaat van de eerste component een lagere energie dan het skyrmion.

In het tweede geval blijft de energie (bij benadering) constant tijdens de overgang.

In het derde geval hangt het precieze gedrag van de energie nog af van de waarde van  $\lambda_0$  (met  $\lambda_0 > 0$ ). We kunnen nu opnieuw drie gevallen onderscheiden (voor  $(\beta - 2\gamma + 1) > 0$ ):

- $\lambda_0 = 0 \Leftrightarrow \Omega + \beta - \gamma = 0$ : De energie van een homogeen condensaat van de tweede component is lager dan de energie van het skyrmion. De energie stijgt monotoon in het interval  $\lambda \in [0, 1]$ . Het is dus energetisch niet voordelig om een skyrmion te vormen.
- $\lambda_0 \in ]0, 1[ \Leftrightarrow 0 < \Omega + \beta - \gamma$  en  $\gamma < 1 - \Omega$ : De energetisch meest voordelige toestand is een gedeeltelijk gevormd skyrmion (zie figuur 6.3). In de praktijk is dit ook een skyrmion, aangezien de relatieve fase met  $-2\pi$  verandert rond het skyrmion. De golffunctie zal op grote afstand van het skyrmion echter naar een mengsel van de twee componenten gaan met een specifieke samenstelling, in plaats van naar een homogeen condensaat van één component. De oorzaak hiervan is dat voor dergelijke waarden van  $\gamma$  ( $\gamma < 1$ ), het in een stilstaand condensaat reeds energetisch voordeliger is om een mengsel te vormen van twee componenten dan om een homogeen condensaat van één component te vormen.
- $\lambda_0 \geq 1 \Leftrightarrow \Omega + \beta - \gamma \geq 1$ : De energie daalt monotoon in het interval  $\lambda \in [0, 1]$ .

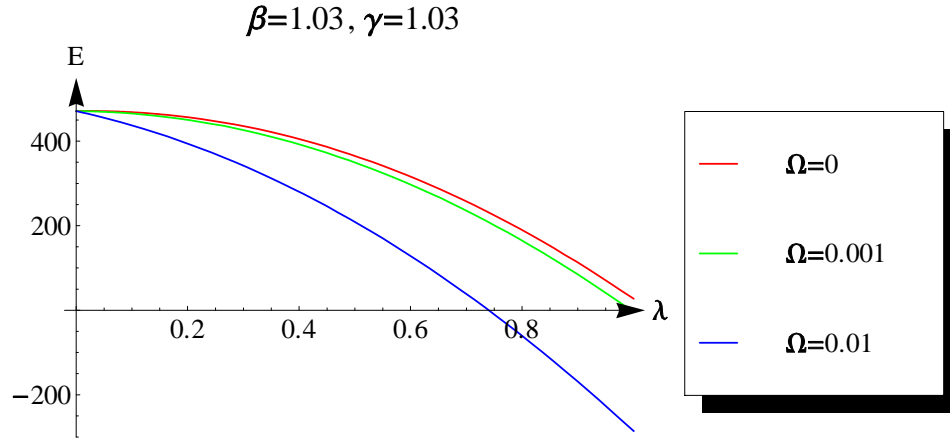
Een voorbeeld van het energieverloop bij  $\beta = 1.03$  en  $\gamma = 1.03$  wordt weergegeven in figuur 6.2. Deze waarden komen overeen met de orde grootte van de parameters voor experimenten in ultrakoude gassen van  $^{23}\text{Na}$  en  $^{87}\text{Rb}$  atomen [16]. We zien dus duidelijk dat we deze methode kunnen gebruiken om een skyrmion te vormen, op voorwaarde dat het skyrmion energetisch voordeliger is dan een homogeen condensaat zonder excitatie. In een eerste kwalitatieve benadering vonden we dat we slechts de energie moeten betalen die nodig is om alle deeltjes in het condensaat om te zetten naar de tweede component. Als  $\lambda = 1$  de toestand is met de laagste energie, is deze energie gegeven door

$$\Delta E = (\beta - 1) \frac{\pi R^2}{2} \quad (6.34)$$

Deze methode is experimenteel realiseerbaar, aangezien men in condensaten van ultrakoude atomen de populatie van de verschillende hyperfijn toestanden kan controleren door het insturen van een radiofrequent elektromagnetisch veld (dus via Rabi oscillaties).

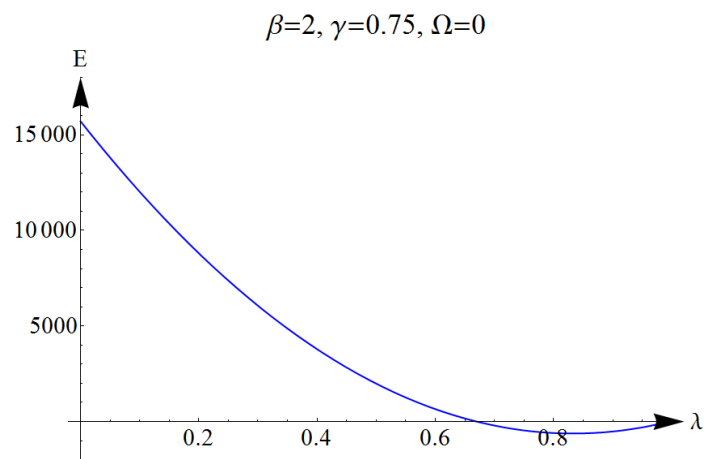
We kunnen dus concluderen dat het niet alleen mogelijk is om een skyrmion te vormen door deze van buiten het condensaat naar binnen te trekken, zoals bij de vortex mogelijk was, maar ook door de pseudospin structuur vanaf de rand zodanig te vervormen dat we de skyrmionstructuur creëren. Het verschil tussen beide methoden is dat we in het eerste geval het skyrmion langs één punt van de rand naar binnen brengen, terwijl we in de hier onderzochte methode het skyrmion vanaf alle punten van de rand naar binnen brengen. In de toekomst moet nog onderzocht worden welke methode om het skyrmion te creëren energetisch het voordeligst is.

Als opmerking moeten we vermelden dat we vonden dat voor  $\gamma < 1$ , de golffunctie op grote afstand van het skyrmion naar een gemengd condensaat gaat in plaats van naar een condensaat van de eerste component,



Figuur 6.2: De energie van de overgangstoestand tussen een homogeen condensaat van de tweede component en een skyrmion bij  $\beta = 1.03$  en  $\gamma = 1.03$  voor verschillende rotatiefrequenties, als functie van de overgangparameter  $\lambda$ . De energie daalt monotoon als functie van  $\lambda$ . Als de energie van de eindtoestand lager is dan nul, is de skyrmiontoestand energetisch voordeliger dan een homogeen condensaat van de eerste component.

zoals we tot hertoe altijd hebben beschouwd. De oorzaak hiervan is dat voor dergelijke waarden van  $\gamma$  ( $\gamma < 1$ ), het in een stilstaand condensaat reeds energetisch voordeliger is om een mengsel te vormen van twee componenten dan om een homogeen condensaat van één component te vormen. In dat geval zal een vortex in een gemengd condensaat ook energetisch voordeliger zijn dan de hier beschouwde vortex in een homogeen ééncomponentenscondensaat. Zijn onze berekeningen dan niet geldig voor  $\gamma < 1$ ? Het antwoord op deze vraag is onzeker. Het grootste verschil in energie tussen de hier beschouwde toestand die altijd op grote afstand van de excitatie naar een homogeen ééncomponentenscondensaat gaat en de toestand die op grote afstand naar een gemengd condensaat gaat, is het verschil in de bulk interactie energie. Deze bijdrage is bij benadering hetzelfde voor de vortextoestand als voor de skyrmiontoestand. Het zal dus een redelijke benadering zijn om het energieverschil tussen de vortextoestand en de skyrmiontoestand te benaderen door het energieverschil tussen de toestanden die evolueren naar een ééncomponentenscondensaat op grote afstand van de excitatie. In de toekomst moet echter nog nagegaan worden of er geen extra effecten optreden te wijten aan dit verschil in de algemene samenstelling van het condensaat, bvb. een mogelijke vergroting of verkleining van het gebied waarbinnen de skyrmionoplossing instabiel is. We moeten onze resultaten voor  $\gamma < 1$  dus met enige voorzichtigheid interpreteren. Voor  $\gamma > 1$  is er geen probleem.



Figuur 6.3: De energie van de overgangstoestand tussen een homogeen condensaat van de tweede component en een skyrmion bij  $\beta = 2$ ,  $\gamma = 0.75$  en  $\Omega = 0$ , als functie van de overgangsparemeter  $\lambda$ . Merk op dat de energie niet minimaal is in  $\lambda = 1$ , maar in een overgangstoestand.



## Deel III

# Twée topologische excitaties



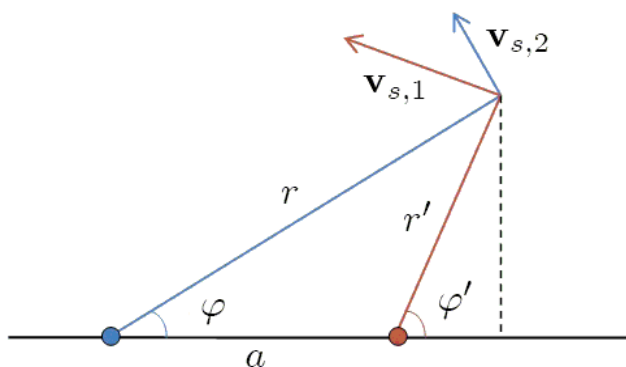


# Hoofdstuk 7

## Twee vortices

In dit hoofdstuk onderzoeken we de interactiepotentiaal tussen twee vortices. We beginnen met de beschrijving van het snelheidsveld en de probeergolffunctie voor twee vortices op afstand  $a$  van elkaar. Vervolgens passen we de technieken uit hoofdstuk 3 voor de variationele behandeling van één vortex toe om de energie van de twee vortices te berekenen. Daaruit kunnen we opnieuw de variationele parameter  $\alpha$  berekenen, wat ons uiteindelijk de volledige interactiepotentiaal oplevert. Tot slot bestuderen we de eigenschappen van de interactiepotentiaal en onderzoeken we het nut van het variationeel aanpassen van de grootte  $\frac{1}{\alpha}$  van de vortex bij het berekenen van de interactiepotentiaal. De berekeningen werden uitgevoerd door Caroline Van Born in haar bachelorthesis. Hier geven we een overzicht van de belangrijkste stappen en resultaten.

### 7.1 Beschrijving



Figuur 7.1: Weergave van de coördinaten waarmee we posities ten opzichte van de twee vortices kunnen beschrijven.

Eerder hebben we telkens vortices beschreven in cilindercoördinaten vanuit een referentiestelsel waarvan de oorsprong in de kern van de vortex lag. Dit had als grote voordeel dat we de symmetrie van het systeem maximaal konden benutten. In het geval van twee vortices wordt een deel van deze symmetrie gebroken en moeten we een manier vinden om de parameters van de ene vortex te beschrijven in het referentiestelsel van de andere vortex. We kiezen onze oorsprong in de kern van de eerste vortex. We nemen aan dat het condensaat homogeen is in  $z$ -richting, zodat we enkel rekening moeten houden met de coördinaten  $r$  en  $\theta$ . Verder oriënteren we ons assenstelsel zodanig dat de kern van de tweede vortex zich in  $(r = a, \varphi = 0)$  bevindt. Het referentiestelsel van de tweede vortex beschrijven we aan de hand van de coördinaten  $r'$  en  $\varphi'$  (zie figuur

7.1). Deze parameters kunnen herschreven worden naar de parameters van het eerste referentiestelsel via

$$\begin{cases} r' = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar \cos \varphi} \\ r' \sin \varphi' = r \sin \varphi \\ r' \cos \varphi' + a = r \cos \varphi \end{cases} \quad (7.1)$$

De aparte golffuncties van de twee vortices (dus van een homogeen condensaat met één vortex op de positie van de eerste resp. tweede vortex) worden gegeven door

$$\begin{cases} \psi_1 = \rho_\infty \tanh(\alpha r) e^{i\varphi} \\ \psi_2 = \rho_\infty \tanh(\alpha r') e^{i\varphi'} \end{cases} \quad (7.2)$$

In hydrodynamische notatie wordt dit

$$\begin{cases} f_1 = \tanh(\alpha r), \theta_1 = n_1 \varphi \\ f_2 = \tanh(\alpha r'), \theta_2 = n_2 \varphi' \end{cases} \quad (7.3)$$

We kunnen hieruit een voorstel doen voor de probeergolffunctie. Voor de probeergolffunctie kiezen we  $f = f_1 f_2$  en  $\theta = \theta_1 + \theta_2$ , zodat

$$\psi = \rho_\infty \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') e^{i(n_1 \varphi + n_2 \varphi')} \quad (7.4)$$

en

$$f = \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r'), \theta = n_1 \varphi + n_2 \varphi' \quad (7.5)$$

De variationele parameter  $\alpha$  die de grootte van de vortices bepaalt, hebben we om symmetrieredenen gelijk gekozen voor beide vortices.

We kunnen het superfluïde snelheidsveld afleiden uit de gradiënt van beide fasen, maar we kunnen ook gewoon de aparte snelheidsvelden optellen. Deze worden gegeven door

$$\begin{cases} \mathbf{v}_{s,1} = \frac{n_1}{r} [-\sin(\varphi) \mathbf{e}_x + \cos(\varphi) \mathbf{e}_y] \\ \mathbf{v}_{s,2} = \frac{n_2}{r'} [-\sin(\varphi') \mathbf{e}_x + \cos(\varphi') \mathbf{e}_y] \end{cases} \quad (7.6)$$

$n_1$  en  $n_2$  drukken het aantal circulatiekwanta uit van de vortex. In de praktijk worden er geen vortices gevormd met meer dan één circulatiekwantum. We moeten hier dus slechts twee gevallen beschouwen:

- $n_1 = n_2 = 1$ : Twee vortices die roteren in dezelfde zin, oftewel een vortex-vortex paar.
- $n_1 = 1$  en  $n_2 = -1$ : Twee vortices die roteren in tegengestelde zin, oftewel een vortex-antivortex paar. In het omgekeerde geval ( $n_1 = 1$  en  $n_2 = -1$ ) veranderen we de vortices van naam, zodat het terug herleid wordt tot dit geval.

We kunnen nu reeds  $n_1 = 1$  stellen. Het snelheidsveld van de tweede vortex wordt in het referentiestelsel van de eerste vortex gegeven door

$$\mathbf{v}_{s,2} = \frac{n_2}{r'} \left[ -\frac{r}{r'} \sin(\varphi) \mathbf{e}_x + \left( \frac{r}{r'} \cos(\varphi) - \frac{a}{r'} \right) \mathbf{e}_y \right] \quad (7.7)$$

We hebben  $r' = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar \cos \varphi}$  nog als  $r'$  in de uitdrukking laten staan, om onze uitdrukking niet onnodig ingewikkeld te maken. Het totale snelheidsveld wordt gegeven door de som  $\mathbf{v}_s = \mathbf{v}_{s,1} + \mathbf{v}_{s,2}$  van beide snelheidsvelden.

$$\mathbf{v}_s = - \left[ \frac{1}{r} + n_2 \frac{r}{(r')^2} \right] \sin(\varphi) \mathbf{e}_x + \left[ \left( \frac{1}{r} + n_2 \frac{r}{(r')^2} \right) \cos(\varphi) - n_2 \frac{a}{(r')^2} \right] \mathbf{e}_y \quad (7.8)$$

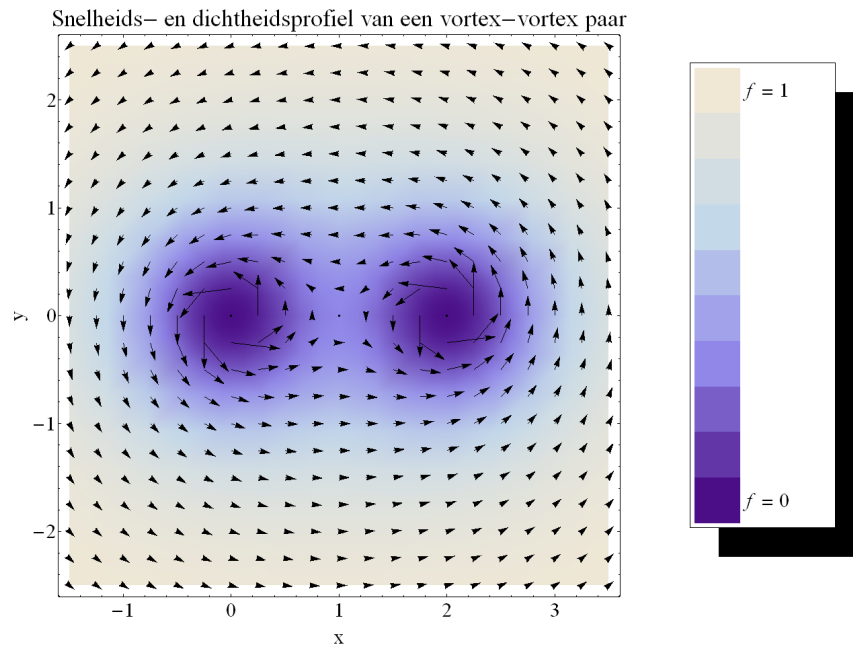
Voor  $n_1 = n_2 = 1$  herleidt dit zich tot

$$v_s^2 = \frac{a^2 + 4r^2 - 4ar \cos(\varphi)}{r^2 (r')^2} \quad (7.9)$$

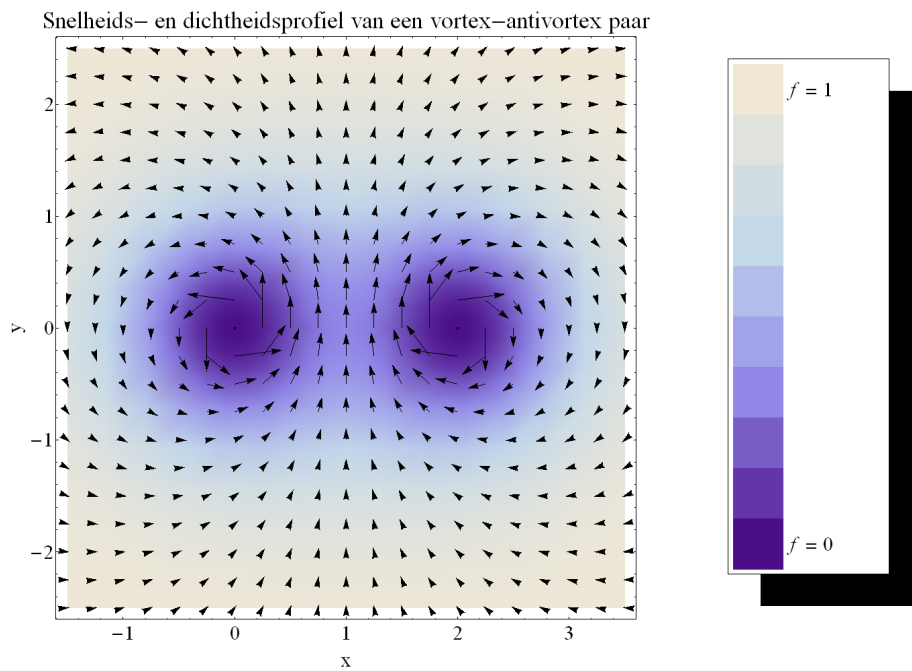
Voor  $n_1 = 1$  en  $n_2 = -1$  komt er

$$v_s^2 = \frac{a^2}{r^2 (r')^2} \quad (7.10)$$

Het snelheids- en dichtheidsprofiel wordt weergegeven in figuur 7.2 voor een vortex-vortex paar en figuur 7.3 voor een vortex-antivortexpaar.



Figuur 7.2: Het snelheids-en dichtheidsprofiel van een vortex-vortexpaar.



Figuur 7.3: Het snelheids-en dichtheidsprofiel van een vortex-antivortexpaar.

## 7.2 Energieberekening

Nu we onze beschrijving hebben vervolledigd, kunnen we de energie van de twee vortices berekenen. Dit doen we aan de hand van een veralgemening van de dimensieloze Gross-Pitaevskii vergelijking uit (3.12), waarbij de bijdrage van de kwantumdruk nu gegeven wordt door

$$\mathcal{E}_{qp} = |\nabla f|^2 \quad (7.11)$$

en de bijdrage van de kinetische energie door

$$\mathcal{E}_{kin} = f^2 \mathbf{v}_s^2 \quad (7.12)$$

De uitdrukking voor de interactie energie blijft gelijk. Verder hangt het integrandum nog af van  $\varphi$ , zodat we de de integraal over  $\varphi$  niet meer kunnen gelijk stellen aan een factor  $2\pi$ . We nemen de bijdrage van het draaimoment niet mee, aangezien we vooral geïnteresseerd zijn in de pure interactiepotentiaal.

$$\begin{aligned} E_{GP} &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} \} \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \left\{ |\nabla f|^2 + f^2 v_s^2 + \left( \frac{(1-f^2)^2}{2} - \frac{1}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (7.13)$$

We berekenen en bestuderen de bijdrage tot de energie van de aparte termen. Vervolgens voegen we de verschillende termen samen en kijken we naar de totale energie. Deze berekening is volledig analoog aan de berekening voor één enkele vortex in hoofdstuk 3. We zullen deze dus niet volledig uitschrijven en geven hier enkel de resultaten in de limiet van een groot condensaat. In het eindresultaat hebben we telkens de substitutie  $x = \alpha r$ ,  $x' = \alpha r$  en  $\tilde{a} = \alpha a$  uitgevoerd, met

$$x' = \sqrt{x^2 + \tilde{a}^2 - 2\tilde{a}x \cos \varphi} \quad (7.14)$$

### 7.2.1 Kwantumdruk

De bijdrage van de kwantumdruk wordt gegeven door

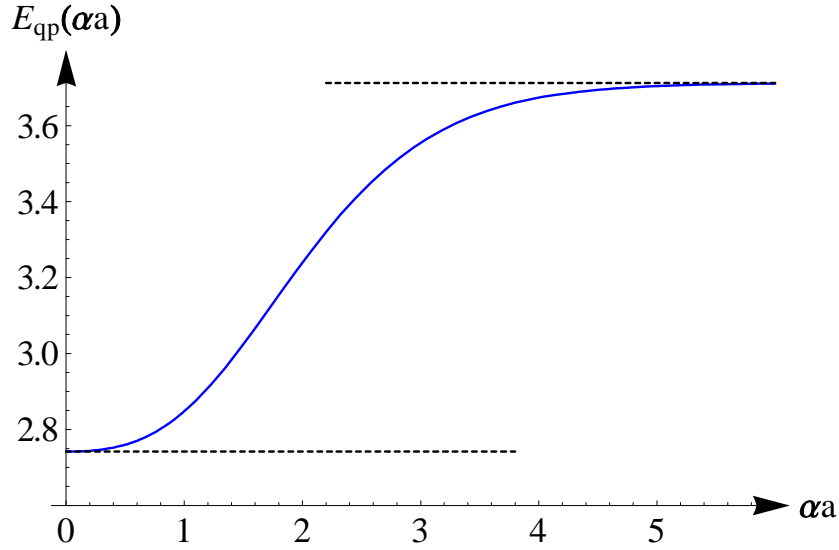
$$E_{qp}(\tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{\tanh^2 x'}{\cosh^4 x} + 2 \frac{\tanh x'}{\cosh^2 x} \frac{\tanh x}{\cosh^2 x} \frac{x - \tilde{a} \cos \varphi}{x'} + \frac{\tanh^2 x}{\cosh^4 x'} \right\} \quad (7.15)$$

Deze integraal is niet analytisch oplosbaar. We kijken eerst naar de limietgevallen:  $\tilde{a} = 0$  en  $\tilde{a} \rightarrow +\infty$ . Voor  $\tilde{a} \rightarrow +\infty$  moeten we tweemaal de kwantumdruk van een enkele vortex terugvinden.

$$E_{qp}(\alpha a \rightarrow 0) = 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ 4 \frac{\tanh^2 x}{\cosh^4 x} \right\} = 2\pi \left( \frac{8 \ln 2 + 1}{15} \right) = 2.74164 \dots$$

$$E_{qp}(\alpha a \rightarrow +\infty) = 2 \times 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{1}{\cosh^4 x} \right\} = 2\pi \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{3} \right) = 3.7125 \dots$$

Vervolgens werken we de integraal numeriek uit in Mathematica als functie van  $\alpha a$ . Het resultaat wordt weergegeven in figuur 7.4. We zien duidelijk dat de kwantumdruk kleiner wordt naarmate de vortices (of de vortex en de antivortex) dichter bij elkaar komen.



Figuur 7.4: De energiebijdrage te wijten aan de kwantumdruk van een vortex-vortex (of een vortex-antivortex paar) als functie van de afstand tussen de vortices (of tussen de vortex en de antivortex).

### 7.2.2 Kinetische energie

We bekijken nu de bijdrage van de kinetische energie. Deze is gegeven door

$$E_{kin} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \mathcal{E}_{kin} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr [f^2 v_s^2] \quad (7.16)$$

Voor een vortex-vortex paar vullen we de uitdrukking voor  $v_s^2$  uit (7.9) in en herschalen we naar  $x = \alpha r$ ,  $x' = \alpha r'$  en  $\tilde{a} = \alpha a$ .

$$E_{kin}^{vv}(\alpha, \tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left[ \tanh^2 x \tanh^2 x' \frac{\tilde{a}^2 + 4x^2 - 4\tilde{a}x \cos(\varphi)}{x(x')^2} \right] \quad (7.17)$$

Voor een vortex-antivortex paar vullen we de uitdrukking voor  $v_s^2$  uit (7.10) in en voeren we dezelfde herschaling uit.

$$E_{kin}^{av}(\tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left[ \tanh^2 x \tanh^2 x' \frac{\tilde{a}^2}{x(x')^2} \right] \quad (7.18)$$

De uitdrukking voor het vortex-vortex paar divergeert logaritmisches voor  $R \rightarrow +\infty$ . De uitdrukking voor het vortex-antivortex paar divergeert niet, omdat de vortex en de antivortex elkaars stroming opheffen op grote afstanden van het paar ( $r \gg a$ ). We zonderen eerst de divergentie in  $E_{kin}^{vv}(\alpha a)$  af. Noteer

$$\mathcal{F}_{vv}(\tilde{a}, x) = \tanh^2 x \int_0^{2\pi} d\varphi \left[ \tanh^2 x' \frac{\tilde{a}^2 + 4x^2 - 4\tilde{a}x \cos(\varphi)}{(x')^2} \right]$$

In de limiet voor grote  $x$  gaat deze functie naar  $8\pi$ . De kinetische energie van het vortex-vortex paar kunnen we dan schrijven als

$$E_{kin}^{vv}(\tilde{a}) = \int_0^{\alpha R} dx \frac{\mathcal{F}_{vv}(\tilde{a}, x)}{x} \quad (7.19)$$

en de divergentie kunnen we afzonderen via

$$E_{kin}^{vv}(\alpha, \tilde{a}) = \int_0^1 dx \frac{\mathcal{F}_{vv}(\tilde{a}, x)}{x} + \int_1^{\alpha R} dx \frac{\mathcal{F}_{vv}(\tilde{a}, x) - 8\pi}{x} + 8\pi [\ln(\alpha) + \ln R] \quad (7.20)$$

Nu kunnen we zonder problemen in de bovengrens van de overblijvende integralen de limiet  $R \rightarrow +\infty$  nemen. Het divergente gedrag is vervat in de term  $\ln R$ . We kunnen nu opnieuw de limietgevallen  $\alpha a \rightarrow 0$  en  $\alpha a \rightarrow +\infty$  bekijken.

$$\mathcal{F}_{vv}(\alpha a \rightarrow 0, x) = 8\pi \tanh^4 x \quad (7.21)$$

$$\begin{aligned} E_{kin}^{vv}(\alpha a \rightarrow 0) &= 8\pi \int_0^1 dx \frac{\tanh^4 x}{x} + 8\pi \int_1^{+\infty} dx \frac{\tanh^4 x - 1}{x} + 8\pi [\ln(\alpha) + \ln R] \\ &= -4.40886 \dots + 8\pi \ln(\alpha) + 8\pi \ln R \end{aligned} \quad (7.22)$$

$$E_{kin}^{av}(\alpha a \rightarrow 0) = 0 \quad (7.23)$$

Als een vortex en een antivortex bij elkaar komen, heffen hun snelheidsvelden elkaar volledig op en is de kinetische energie nul. Als de vortices of de vortex en de antivortex ver van elkaar staan ( $\alpha a \rightarrow +\infty$ ), bekomen we terug tweemaal de kinetische energie van een vortex.

$$E_{kin}^{vv}(\alpha a \rightarrow +\infty) = E_{kin}^{av}(\alpha a \rightarrow +\infty) = 2 \times 2\pi \int_0^{+\infty} dx \left[ \frac{\tanh^2 x}{x} \right] = 4\pi [0.209505 \dots + \ln \alpha + \ln R]$$

De kinetische energie van een vortex-vortex paar neemt toe als de vortices dicht bij elkaar komen. Tussen de twee vortices heffen hun snelheidsvelden elkaar op, ver van het paar versterken hun snelheidsvelden elkaar. Hoe groter het gebied tussen de twee vortices, hoe kleiner de kinetische energie.

De kinetische energie van een vortex-antivortexpaar neemt af als de vortices dicht bij elkaar komen. Tussen de vortex en de antivortex versterken hun snelheidsvelden elkaar. Ver van het paar heffen de snelheidsvelden elkaar op. Het is vanuit het oogpunt van de kinetische energie dus energetisch voordelig om het gebied tussen de vortex en de antivortex te verkleinen.

### 7.2.3 Interactie energie

Als laatste bekijken we de bijdrage van de interactie energie. Deze is gegeven door

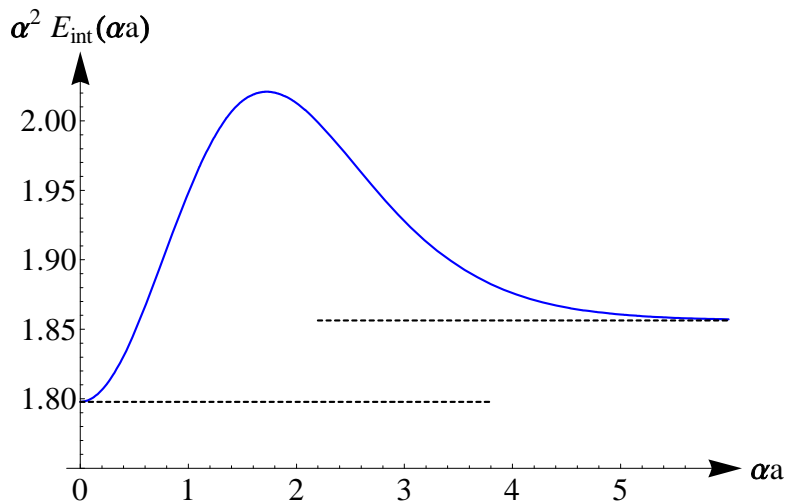
$$E_{int}(\alpha a) = -2\pi \frac{R^2}{2} + \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} x dx \left[ \frac{1}{2} (1 - \tanh^2 x \tanh^2 x')^2 \right] \quad (7.24)$$

De eerste term bevat de divergentie. De overblijvende integraal is convergent, maar is niet analytisch uitwerkbaar. We bekijken eerst de limietgevallen  $\alpha a \rightarrow 0$  en  $\alpha a \rightarrow +\infty$ . Als de afstand tussen de vortices groot is ( $\alpha a \rightarrow +\infty$ ), moeten we opnieuw tweemaal de bijdrage van een enkele vortex bekomen.

$$\alpha^2 (E_{int}(\alpha a \rightarrow 0) - E_0) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} x dx \left[ \frac{1}{2} (1 - \tanh^4 x)^2 \right] = 4\pi \left( \frac{26 \ln 2 - 3}{105} \right) = 1.79781 \dots \quad (7.25)$$

$$\alpha^2 (E_{int}(\alpha a \rightarrow +\infty) - E_0) = 2 \times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} x dx \left[ \frac{1}{2} (1 - \tanh^2 x)^2 \right] = 2\pi \frac{4 \ln 2 - 1}{6} = 1.85625 \dots \quad (7.26)$$

met  $E_0 = -2\pi \frac{R^2}{2}$ . De interactie energie neemt duidelijk toe als de afstand tussen de vortices toeneemt. Dit is te wijten aan het verschil in de hoeveelheid weggeboord condensaat. Het volledige verloop wordt weergegeven in figuur 7.5. Daar zien we dat de interactie energie niet monotoon verloopt tussen de twee limietgevallen, maar een duidelijk maximum vertoont bij  $\alpha a = 1.72538$ , waar  $\alpha^2 (E_{int}(\alpha a \rightarrow +\infty) - E_0) = 2.02097 \dots$

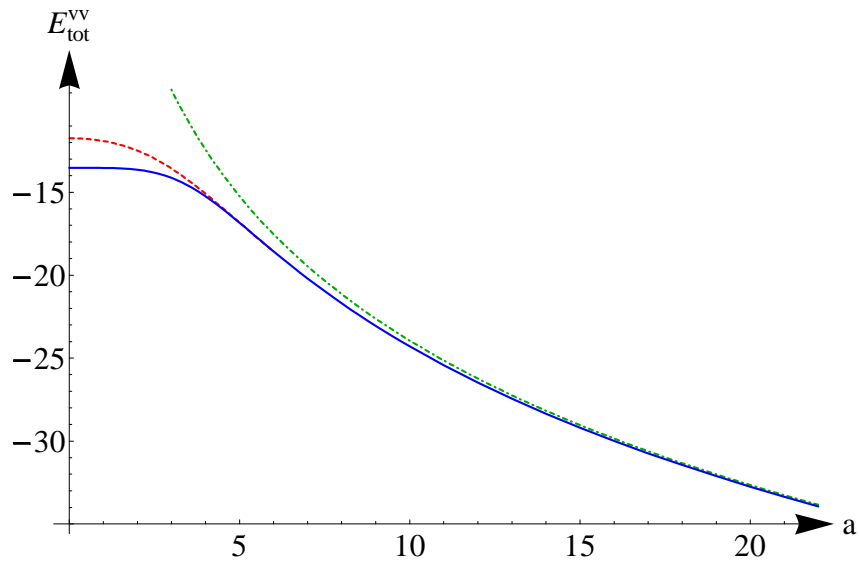


Figuur 7.5: De interactie energie van een vortex-vortex of vortex-antivortex paar als functie van de afstand tussen beide vortices.

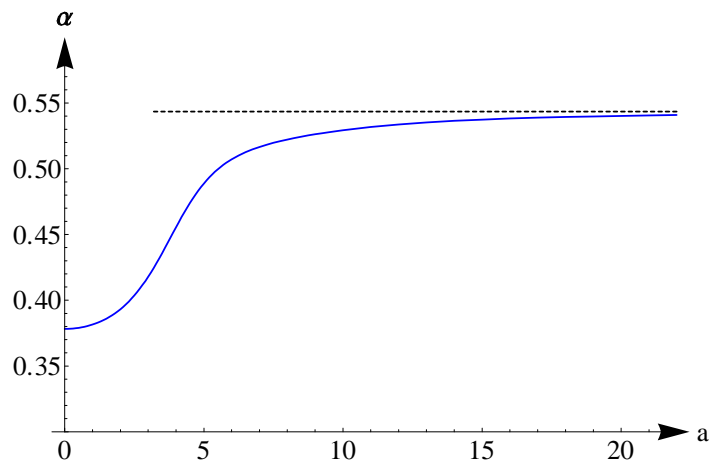
### 7.3 Totale energie

De vortex-vortex potentiaal wordt weergegeven in figuur 7.6. De vortex-antivortexpotentiaal wordt weergegeven in figuur 7.8. Twee vortices stoten elkaar af, een vortex en een antivortex trekken elkaar aan. Beide potentialen zijn logaritmisch voor grote afstanden  $a$  tussen de vortices, zoals ook vaak in de literatuur gebruikt wordt [21]. Dit is vooral te wijten aan de bijdrage van de kinetische energie. Als  $a$  van de orde van de coherentielengte of kleiner wordt, beginnen de vortices elkaar te overlappen en is een logaritmische potentiaal geen goede benadering meer. Verder zien we dan ook een duidelijke invloed van het aanpassen van de vortexgrootte op de potentiaal. Hierdoor wordt de energie verlaagd en worden beide potentialen meer aantrekkelijk dan bij vaste vortexgrootte. In vloeibaar helium is de coherentielengte erg klein en is de fout beperkt, maar in condensaten van ultrakoude gassen kan de coherentielengte groot worden, zelfs van de orde van het ganse systeem, en is deze aanpassing belangrijk.

In figuur 7.7 wordt de optimale waarde van de variationele parameter weergegeven als functie van de afstand  $a$  tussen twee vortices, in figuur 7.9 als functie van de afstand tussen een vortex en een antivortex. Voor een vortex-vortex paar groeien de vortices wanneer ze dichterbij elkaar komen, zodat de toenemende snelheden in de buurt van de vortices onderdrukt worden. Voor een vortex-antivortex paar krimpen de vortices wanneer ze dichterbij elkaar komen, aangezien het gebied met hogere snelheden tussen de vortices in steeds kleiner wordt.

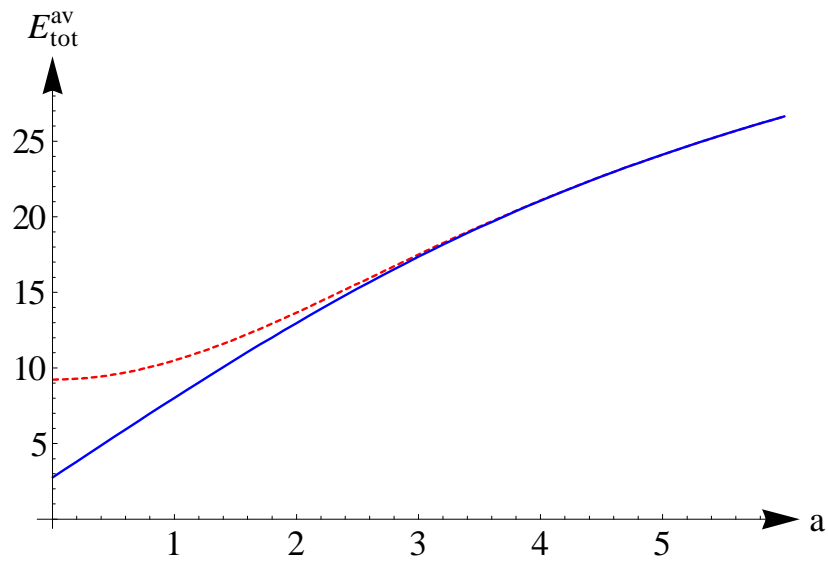


Figuur 7.6: Vortex-vortex potentiaal bij aangepaste vortexgrootte (blauwe volle curve) en vaste vortexgrootte (rood gestreepte curve). De potentiaal wordt vergeleken met de logaritmische potentiaal uit de literatuur (groen gestreept). Het aanpassen van de vortexgrootte verandert duidelijk de potentiaal voor kleine afstanden tussen de vortices.

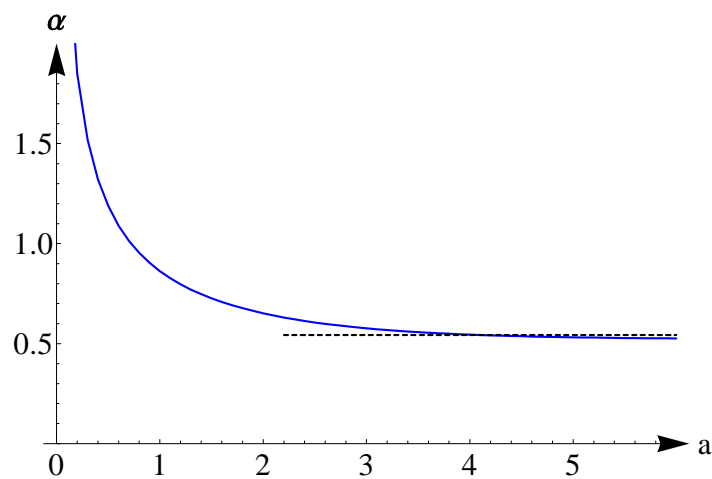


Figuur 7.7: De waarde van  $\alpha$  in het energiminimum als functie van de afstand tussen twee vortices, vergeleken met de waarde van  $\alpha$  voor een geïsoleerde vortex (zwarte stippellijn).





Figuur 7.8: Vortex-antivortex potentiaal bij aangepaste vortexgrootte (blauwe volle curve) en vaste vortexgrootte (rood gestreepte curve). Het aanpassen van de vortexgrootte verandert duidelijk de potentiaal voor kleine afstanden tussen de vortices.



Figuur 7.9: De waarde van  $\alpha$  in het energiminimum als functie van de afstand tussen een vortex en een antivortex, vergeleken met de waarde van  $\alpha$  voor een geïsoleerde vortex (zwarte stippellijn).



# Hoofdstuk 8

## Twee skyrmionen

We onderzoeken hier de interactiepotentiaal tussen twee skyrmionen. We beginnen met de beschrijving van het systeem, waarbij we de beschrijving voor de eerste component kunnen overnemen uit het geval van twee vortices in een ééncomponentcondensaat. Vervolgens gebruiken we de Gross-Pitaevskii energiefunctieaal om de verschillende bijdragen tot de energie te berekenen. Deze bijdrage voegen we samen tot een interactiepotentiaal. Tot slot bestuderen we de relatie tussen de variationele parameter  $\alpha$ , de afstand  $a$  tussen de twee skyrmionen en de interactiepotentiaal. Dit vergelijken we met het resultaat voor de vortices en we onderzoeken het nut van het variationeel aanpassen van de skyrmiongrootte  $\frac{1}{\alpha}$  bij het bepalen van de interactiepotentiaal.

### 8.1 Beschrijving

#### 8.1.1 Dichtheid, fase en snelheidsveld

Zoals we zonet hebben vermeld, kunnen we de beschrijving voor twee vortices in een ééncomponentcondensaat overnemen voor de eerste component. We beginnen met het dichtheidsprofiel. Voor de eerste component wordt dit gegeven door (7.5).

$$f_1 = \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \quad (8.1)$$

Hierbij werken we met dezelfde coördinaten  $(r, \varphi)$  en  $(r', \varphi')$  uit het geval met de vortices. De dichtheid van de tweede component is complementair aan de eerste, zodanig dat de totale dichtheid  $f = f_1^2 + f_2^2 = 1$  is.

$$f_2 = \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \quad (8.2)$$

$f_1$  en  $f_2$  beschrijven samen het dichtheidsprofiel.

We kunnen nu kijken naar de fase van de golf functie en het snelheidsprofiel. De fase van de eerste component wordt gegeven door (7.5).

$$\theta_1 = \varphi \pm \varphi' \quad (8.3)$$

De fase van de tweede component is nul,  $\theta_2 = 0$ . De totale fase en de relatieve fase zijn dan gegeven door

$$\theta_T = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} = \frac{\varphi + \varphi'}{2} \quad (8.4)$$

$$\phi = \theta_2 - \theta_1 = -(\varphi + \varphi') \quad (8.5)$$

voor een skyrmion-skyrmion paar en door

$$\theta_T = \frac{\varphi - \varphi'}{2} \quad (8.6)$$

$$\phi = -(\varphi - \varphi') \quad (8.7)$$

voor een skyrmion-antiskyrmion paar. De effectieve snelheid wordt gegeven door

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \frac{f_1^2 \mathbf{v}_{s,1} + f_2^2 \mathbf{v}_{s,2}}{f^2} \quad (8.8)$$

De snelheid  $\mathbf{v}_{s,2}$  van de tweede component is nul. De snelheid  $\mathbf{v}_{s,1}$  van de eerste component wordt gegeven door (7.8) met  $n_1 = n_2 = 1$  voor een skyrmion-skyrmion paar en  $n_1 = 1, n_2 = -1$  voor een skyrmion-antiskyrmion paar. Voor een skyrmion-skyrmion paar wordt het effectieve snelheidsveld dus gegeven door

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{s,eff}^{ss} = f_1^2 \mathbf{v}_{s,1}^{ss} = \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') & \left\{ - \left[ \frac{1}{r} + \frac{r}{(r')^2} \right] \sin(\varphi) \mathbf{e}_x \right. \\ & \left. + \left[ \left( \frac{1}{r} + \frac{r}{(r')^2} \right) \cos(\varphi) - \frac{a}{(r')^2} \right] \mathbf{e}_y \right\} \end{aligned} \quad (8.9)$$

$$(v_{s,eff}^{ss})^2 = \tanh^4(\alpha r) \tanh^4(\alpha r') \left( \frac{a^2 + 4r^2 - 4ar \cos(\varphi)}{r^2 (r')^2} \right) \quad (8.10)$$

en voor een skyrmion-antiskyrmion paar door

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{s,eff}^{sa} = f_1^2 \mathbf{v}_{s,1}^{sa} = \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') & \left\{ - \left[ \frac{1}{r} - \frac{r}{(r')^2} \right] \sin(\varphi) \mathbf{e}_x \right. \\ & \left. + \left[ \left( \frac{1}{r} - \frac{r}{(r')^2} \right) \cos(\varphi) + \frac{a}{(r')^2} \right] \mathbf{e}_y \right\} \end{aligned} \quad (8.11)$$

$$(v_{s,eff}^{sa})^2 = \tanh^4(\alpha r) \tanh^4(\alpha r') \left( \frac{a^2}{r^2 (r')^2} \right) \quad (8.12)$$

### 8.1.2 Pseudospin structuur

Om de pseudospin textuur te bepalen, berekenen we de menghoek  $\alpha_{mix}$  en relatieve fase  $\phi$ . We beginnen met het bepalen van de menghoek uit het dichtheidsprofiel.

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \\ \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \end{pmatrix} \quad (8.13)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \cos(\alpha_{mix}) = 2 \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') - 1 \\ \sin(\alpha_{mix}) = 2 \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \end{cases} \quad (8.14)$$

De relatieve fase  $\phi$  wordt gegeven door (8.5) voor een skyrmion-skyrmion paar en (8.7) voor een skyrmion-antiskyrmion paar. Hieruit kunnen we  $\sin \phi$  en  $\cos \phi$  berekenen. Voor een skyrmion-antiskyrmion paar levert dit

$$\begin{aligned} \sin \phi &= -\sin(\varphi + \varphi') = -\cos \varphi \sin \varphi' - \cos \varphi' \sin \varphi \\ &= -\cos \varphi \frac{r}{r'} \sin \theta - \frac{(r \cos \varphi - a)}{r'} \sin \varphi \\ &= -\frac{r}{r'} \sin(2\varphi) + \frac{a}{r'} \sin \varphi \end{aligned} \quad (8.15)$$

$$\begin{aligned} \cos \phi &= \cos(\varphi + \varphi') = \cos \varphi \cos \varphi' - \sin \varphi \sin \varphi' \\ &= \cos \theta \frac{(r \cos \varphi - a)}{r'} - \sin \varphi \frac{r}{r'} \sin \varphi \\ &= \frac{r}{r'} \cos(2\varphi) - \frac{a}{r'} \cos \varphi \end{aligned} \quad (8.16)$$

De volledige pseudospin textuur wordt dan gegeven door

$$\begin{cases} S_x = 2 \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \left[ \frac{r}{r'} \cos(2\varphi) - \frac{a}{r'} \cos \varphi \right] \\ S_y = 2 \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \left[ -\frac{r}{r'} \sin(2\varphi) + \frac{a}{r'} \sin \varphi \right] \\ S_z = 2 \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') - 1 \end{cases} \quad (8.17)$$

Deze wordt weergegeven in figuur 8.1. Voor een skyrmion-antiskyrmion paar berekenen we op analoge wijze

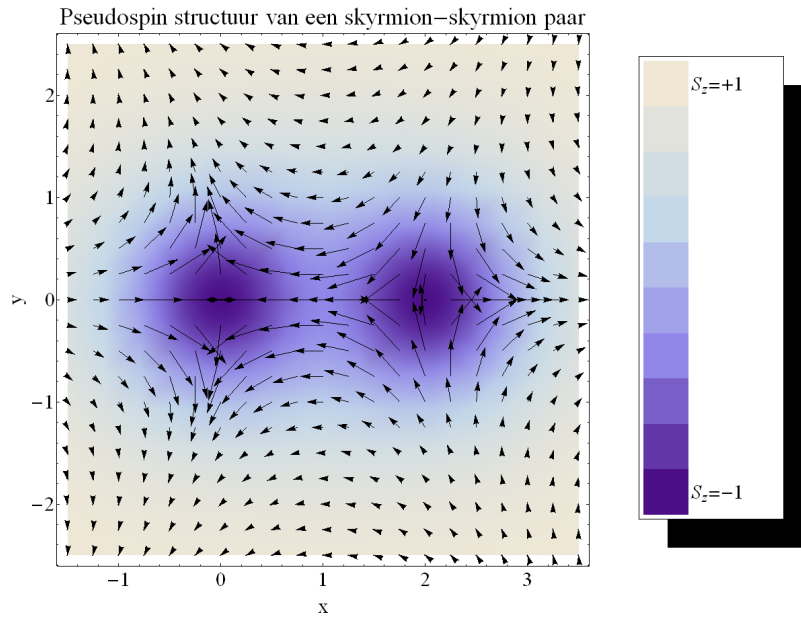
$$\sin \phi = -\sin(\varphi - \varphi') = -\frac{a}{r'} \sin \varphi \quad (8.18)$$

$$\cos \phi = \cos(\varphi - \varphi') = \frac{r}{r'} - \frac{a}{r'} \cos \varphi \quad (8.19)$$

De volledige pseudospin textuur wordt in het skyrmion-antiskyrmion geval dus gegeven door

$$\begin{cases} S_x = 2 \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \left[ \frac{r}{r'} - \frac{a}{r'} \cos \varphi \right] \\ S_y = 2 \tanh(\alpha r) \tanh(\alpha r') \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \left[ -\frac{a}{r'} \sin \varphi \right] \\ S_z = 2 \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') - 1 \end{cases} \quad (8.20)$$

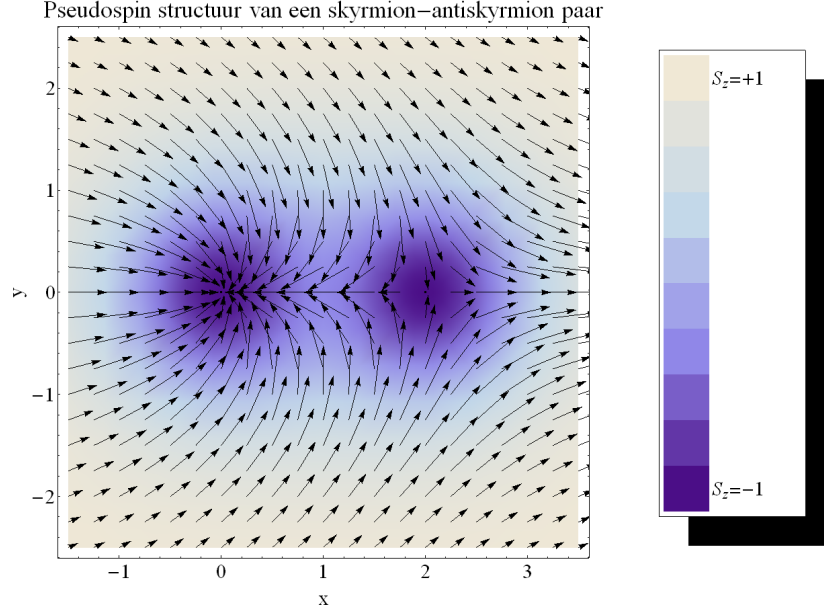
en wordt weergegeven in figuur 8.1.



Figuur 8.1: De pseudospin structuur van een skyrmion-skyrmion paar. De vectoren zijn projecties van de pseudospin  $\mathbf{S}$  op het  $xy$ -vlak. De kleurschakering geeft de grootte van  $S_z$  weer.

## 8.2 Energieberekening

We kunnen nu de verschillende termen van de energie berekenen. Aangezien we hier de pure interactiepotentiaal willen bestuderen, nemen we de term met het draaimoment niet mee. We gaan dus uit van een niet-roterend condensaat. De totale energie (per lengte-eenheid) van een niet-roterend condensaat dat homogeen is in  $z$ -richting wordt gegeven door



Figuur 8.2: De pseudospin structuur van een skyrmion-antiskyrmion paar. De vectoren zijn projecties van de pseudospin  $\mathbf{S}$  op het  $xy$ -vlak. De kleurschakering geeft de grootte van  $S_z$  weer.

$$E_{GP} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{ps} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{magn} \} \quad (8.21)$$

$$= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \left\{ (\nabla f)^2 + \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 + f^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 - f^2 \left( \mu - \frac{1}{2} f^2 \right) + \frac{f^4}{4} \left[ \frac{(\beta - 1)}{2} (S_z - 1)^2 + (\gamma - 1) (1 - S_z^2) \right] \right\} \quad (8.22)$$

De bijdrage  $\mathcal{E}_{qp}$  van de kwantumdruk valt weg, omdat de totale dichtheid  $f$  constant is. We moeten dus enkel de pseudospin bijdrage, de kinetische energie en de interactie energie (met twee bijdragen  $\mathcal{E}_{int}$  en  $\mathcal{E}_{magn}$ ) bekijken.

### 8.2.1 Pseudospin bijdrage

De eerste bijdrage die we zullen bekijken is de bijdrage van de pseudospin. Deze is gegeven door

$$E_{ps} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \mathcal{E}_{ps} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R r dr \left\{ \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 \right\} \quad (8.23)$$

We bekijken eerst een skyrmion-skyrmion paar. Om  $\mathcal{E}_{ps}$  uit te rekenen, gebruiken we uitdrukking (4.31) voor  $(\nabla \mathbf{S})^2$ . Het resultaat wordt gegeven door

$$\mathcal{E}_{ps}^{ss} = \frac{\alpha^2}{1 - \tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r')} \left[ \frac{\tanh^2(\alpha r')}{\cosh^4(\alpha r)} + \frac{\tanh^2(\alpha r)}{\cosh^4(\alpha r')} + 2 \frac{\tanh(\alpha r') \tanh(\alpha r)}{\cosh^2(\alpha r) \cosh^2(\alpha r')} \frac{(r - a \cos \varphi)}{r'} \right] + [\tanh^2(\alpha r) \tanh^2(\alpha r') - \tanh^4(\alpha r) \tanh^4(\alpha r')] \left[ \frac{a^2 + 4r^2 - 4ar \cos \varphi}{r^2 (r')^2} \right] \quad (8.24)$$

Als we dan ook de substitutie  $x = \alpha r$ ,  $x' = \alpha r'$  en  $\tilde{a} = \alpha a$  uitvoeren, bekomen we voor de energiebijdrage van de pseudospin gradiënt

$$E_{ps}^{ss}(\tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left\{ \frac{1}{1 - \tanh^2 x \tanh^2 x'} \left[ \frac{\tanh^2 x'}{\cosh^4 x} + \frac{\tanh^2 x}{\cosh^4 x'} + 2 \frac{\tanh x' \tanh x}{\cosh^2 x \cosh^2 x'} \frac{(x - \tilde{a} \cos \varphi)}{x'} \right] \right. \\ \left. + [\tanh^2 x \tanh^2 x' - \tanh^4 x \tanh^4 x'] \left[ \frac{\tilde{a}^2 + 4x^2 - 4\tilde{a}x \cos(\varphi)}{x^2 (x')^2} \right] \right\} \quad (8.25)$$

Deze integraal is convergent voor  $R \rightarrow +\infty$ , maar niet analytisch oplosbaar. We bekijken eerst de limietgevallen voor  $\alpha a \rightarrow 0$  en  $\alpha a \rightarrow +\infty$ . Voor  $\alpha a \rightarrow +\infty$  moeten we tweemaal de pseudospin bijdrage van een enkel skyrmion terugvinden.

$$E_{ps}^{ss}(\alpha a \rightarrow 0) = 2\pi \int_0^{+\infty} dx \left\{ \frac{1}{1 - \tanh^4 x} \left[ 4 \frac{\tanh^2 x}{\cosh^4 x} \right] + 4 \frac{\tanh^4 x}{x^2} [1 - \tanh^4 x] \right\} = 12.7520 \dots \quad (8.26)$$

$$E_{ps}^{ss}(\alpha a \rightarrow +\infty) = 2 \times 2\pi \int_0^{+\infty} dx \left\{ \frac{1}{\cosh^2 x} \left( 1 + \frac{\tanh^2 x}{x^2} \right) \right\} = 13.5475 \dots \quad (8.27)$$

De bijdrage van de pseudospin druk neemt dus toe als de afstand tussen de skyrmionen toeneemt. We hebben de integraal in (8.25) ook numeriek uitgewerkt in Mathematica als functie van  $\alpha a$ . Het resultaat wordt weergegeven in figuur 8.3. We zien duidelijk dat  $E_{ps}^{ss}(\alpha a)$  niet monotoon stijgt. Het vertoont een maximum bij  $\alpha a = 6.98$  en  $E_{ps}^{ss} = 13.6202$ . Voorbij het maximum daalt  $E_{ps}^{ss}$  langzaam tot de limietwaarde voor  $\alpha a \rightarrow +\infty$ .

De pseudospin wordt bepaald door twee variabelen: de menghoek  $\alpha_{mix}$  en de relatieve fase  $\phi$ . Het gedrag van  $E_{ps}^{ss}$  als functie van  $\alpha a$  wordt dus bepaald door twee effecten. Het eerste effect is gerelateerd aan verschillen in de menghoek  $\alpha_{mix}$ . Beide skyrmionen vervormen het pseudospin veld. Ze zorgen ervoor dat het pseudospin veld zich moet herstellen van  $S_z = -1$  in de kern van het skyrmion tot  $S_z = 1$  ver van de kern van het skyrmion. Dit veroorzaakt variatie van de menghoek rond de skyrmionen. Tussen de twee skyrmionen in moet het pseudospin veld zich niet helemaal herstellen tot  $S_z = 1$ , waardoor de pseudospin minder verdraaid moet worden en de energiebijdrage van de pseudospin gradiënt verlaagd wordt. Dit effect domineert bij kleine  $\alpha a$  en bepaalt de stijging van  $E_{ps}^{ss}$  van  $\alpha a = 0$  tot aan het maximum.

Bij grotere waarden van  $\alpha a$  begint het effect van de relatieve fase belangrijk te worden. Ver van het skyrmionpaar versterken de snelheidsvelden van beide skyrmionen elkaar. Tussen de twee skyrmionen in heffen de snelheidsvelden elkaar op. Snelheid wordt veroorzaakt door gradiënten in de totale fase en gradiënten in de relatieve fase. Een verlaging van de snelheid van één component betekent een verlaging van de gradiënt van de relatieve fase en dus ook van de pseudospin gradiënt. Dit veroorzaakt de lichte daling van  $E_{ps}^{ss}$  voorbij het maximum.

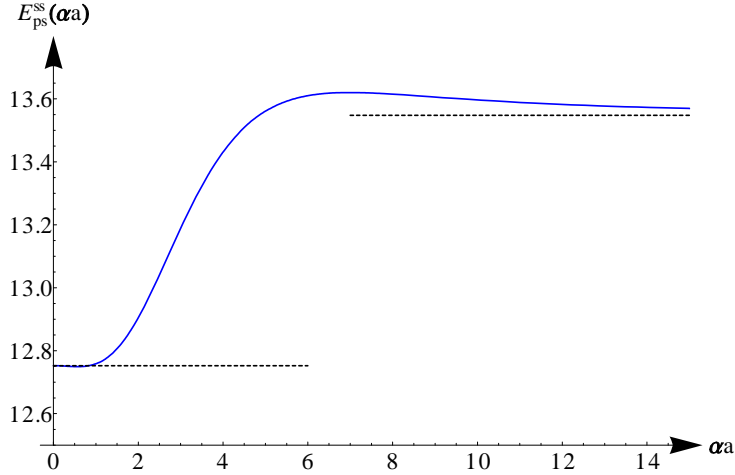
In het geval van een skyrmion-antiskyrmionpaar, wordt de bijdrage van de pseudospin analoog berekend.

$$E_{ps}^{as}(\tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left\{ \frac{1}{1 - \tanh^2(x) \tanh^2(x')} \left[ \frac{\tanh^2(x')}{\cosh^4(x)} + \frac{\tanh^2(x)}{\cosh^4(x')} \right] \right. \\ \left. + 2 \frac{\tanh(x') \tanh(x)}{\cosh^2(x) \cosh^2(x')} \frac{(x - \tilde{a} \cos \theta)}{x'} \right] \\ \left. + [\tanh^2(x) \tanh^2(x') - \tanh^4(x) \tanh^4(x')] \left[ \frac{\tilde{a}^2}{x^2 (x')^2} \right] \right\} \quad (8.28)$$

Ook deze bijdrage is convergent voor  $R \rightarrow +\infty$ , maar niet analytisch oplosbaar. We werken dus eerst de limietgevallen  $\alpha a \rightarrow 0$  en  $\alpha a \rightarrow +\infty$  uit. Voor  $\alpha a \rightarrow +\infty$  moeten we tweemaal de pseudospin bijdrage van een enkel skyrmion terugvinden, gegeven door uitdrukking (8.27).

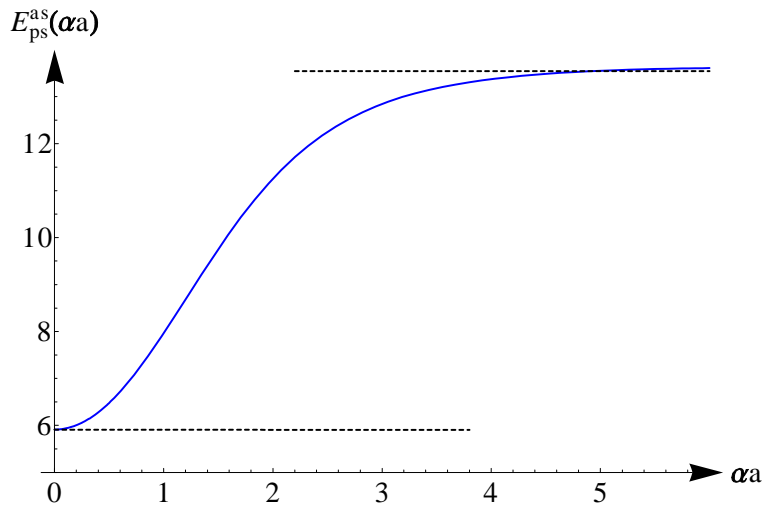
$$E_{ps}^{as}(\alpha a \rightarrow 0) = 2\pi \int_0^{+\infty} dx \left\{ \frac{1}{1 - \tanh^4 x} \left[ 4 \frac{\tanh^2 x}{\cosh^4 x} \right] \right\} = 5.91033 \dots \quad (8.29)$$

Vervolgens hebben we de integraal in (8.28) numeriek uitgewerkt in Mathematica als functie van  $\alpha a$ . Het resultaat wordt weergegeven in figuur 8.4. We zien duidelijk dat  $E_{ps}^{as}(\alpha a)$  een monotoon stijgende functie is.



Figuur 8.3: De bijdrage van de pseudospin gradiënt tot de energie van een skyrmion-skyrmion paar als functie van de afstand tussen de skyrmionen.

Bij het skyrmion-antiskyrmion paar zien we opnieuw twee effecten op de pseudospin. Ten eerste geldt hetzelfde effect van de menghoek  $\alpha_{mix}$  als bij het skyrmionpaar, waarbij het pseudospin veld zich niet helemaal moet herstellen van  $S_z = -1$  tot  $S_z = 1$  tussen de twee skyrmionen in. Hierdoor moet de pseudospin minder verdraaid worden als de skyrmionen zich dichterbij elkaar bevinden. Het effect van de relatieve fase zien we ook terug voor het skyrmion-antiskyrmion paar, maar zal nu in omgekeerde richting werken. Hoe dichterbij het skyrmion en het antiskyrmion zich bij elkaar bevinden, hoe meer hun snelheidsvelden elkaar zullen opheffen en hoe meer hun pseudospin elkaar zal compenseren. Dit zal de pseudospin bijdrage tot de energie nog extra verlagen. De enige overblijvende bijdrage tot de pseudospin gradiënt is te wijten aan het feit dat we in onze beschrijving bij  $\alpha a = 0$  nog altijd hetzelfde dichtheidsprofiel gebruiken als voor het skyrmion, waardoor er nog een pseudospin gradiënt te wijten aan de dichtheidsveranderingen zal overblijven in  $\alpha a = 0$ .



Figuur 8.4: De bijdrage van de pseudospin gradiënt tot de energie van een skyrmion-antiskyrmion paar als functie van de afstand tussen het skyrmion en het antiskyrmion.



### 8.2.2 Kinetische energie

De volgende bijdrage is de kinetische energie. We bekijken eerst het skyrmion-skyrmion paar. Het effectieve snelheidsveld is gegeven door (8.9), zodat

$$E_{kin}^{ss}(\alpha, \tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left\{ \tanh^4 x \tanh^4 x' \frac{\tilde{a}^2 + 4x^2 - 4\tilde{a}x \cos \varphi}{x(x')^2} \right\} \quad (8.30)$$

In tegenstelling tot de pseudospin bijdrage, is deze integraal echter niet convergent voor  $R \rightarrow +\infty$ . We zullen er dus een constante oneindige term af moeten trekken en terug bijtellen. De divergentie in het integrandum gaat volgens  $\frac{1}{x}$ . De voor de hand liggende keuze voor deze term is dus  $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_1^{\alpha R} \frac{dx}{x} = 2\pi \int_1^{\alpha R} \frac{dx}{x}$ . De ondergrens hebben we verschillend van nul gekozen, aangezien we anders een extra divergentie introduceren. Noteer

$$\mathcal{F}_{ss}(\tilde{a}, x) = \tanh^4 x \int_0^{2\pi} d\varphi \left[ \tanh^4 x' \frac{\tilde{a}^2 + 4x^2 - 4\tilde{a}x \cos \varphi}{(x')^2} \right] \quad (8.31)$$

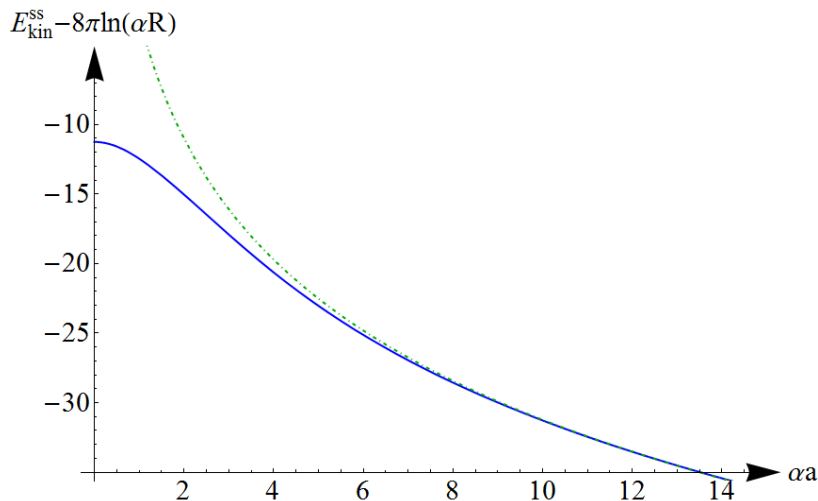
In de limiet  $x \rightarrow +\infty$  gaat deze functie naar  $\mathcal{F}_{ss}(\tilde{a}, r) \rightarrow 8\pi$ . De kinetische energie kan dan geschreven worden als

$$E_{kin}^{ss} = \int_0^{\alpha R} dx \frac{\mathcal{F}_{ss}(\tilde{a}, x)}{x} \quad (8.32)$$

en de divergentie kan weggewerkt worden via

$$E_{kin}^{ss}(\alpha, \tilde{a}) = \int_0^1 dx \frac{\mathcal{F}_{ss}(\tilde{a}, x)}{x} + \int_1^{\alpha R} dx \frac{\mathcal{F}_{ss}(\tilde{a}, x) - 8\pi}{x} + 8\pi (\ln \alpha + \ln R) \quad (8.33)$$

Het divergente gedrag is vervat in de term  $8\pi \ln R$ . We kunnen nu zonder problemen de limiet  $R \rightarrow +\infty$  nemen van de resterende integralen. Deze hebben we numeriek uitgewerkt in Mathematica als functie van  $\alpha a$ . Het resultaat wordt gegeven in figuur 8.5. We zien duidelijk dat de kinetische energie afneemt als de afstand tussen de skyrmionen toeneemt. Tussen de twee skyrmionen heffen de snelheidsvelden elkaar op. Ver van het paar ( $r \gg a$ ) versterken de snelheidsvelden elkaar. Hoe groter de afstand tussen de skyrmionen, hoe groter het gebied waarin de snelheid verlaagd wordt en hoe lager de kinetische energie. Als de afstand tussen de vortices groot is, benadert de kinetische energie een logaritmische potentiaal.



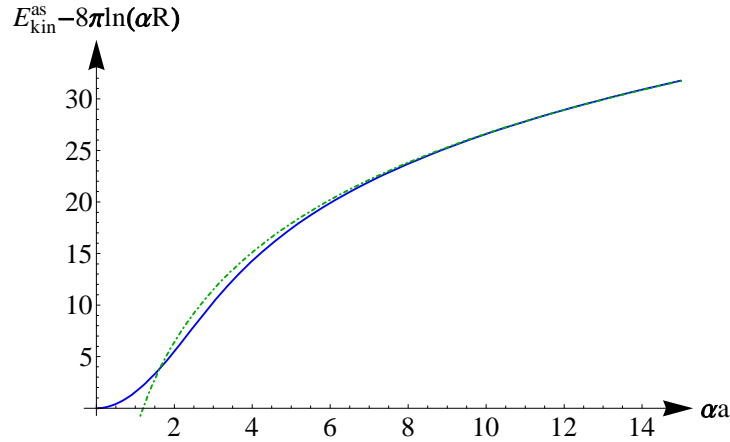
Figuur 8.5: De kinetische energie van een skyrmion-skyrmion paar als functie van de afstand tussen de skyrmionen, vergeleken met een logaritmische potentiaal (groen gestreepte curve).

We kunnen analoog dezelfde berekening uitvoeren voor de kinetische energie van een skyrmion-antiskyrmion paar. Dit levert

$$E_{kin}^{as}(\alpha, \tilde{a}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} dx \left\{ \tanh^4 x \tanh^4 x' \frac{\tilde{a}^2}{x(x')^2} \right\} \quad (8.34)$$

Het grote verschil met het skyrmion-skyrmion geval is dat deze integraal reeds convergent is, zodat we geen renormalisatie moeten uitvoeren. Op grote afstand van het paar compenseren de snelheidsvelden van het skyrmion en het antiskyrmion elkaar, zodat de kinetische energie eindig blijft. We hebben de integraal voor  $R \rightarrow +\infty$  numeriek uitgewerkt in Mathematica als functie van  $\alpha a$ . Het resultaat wordt weergegeven in figuur ???. We zien duidelijk dat de kinetische energie toeneemt als de afstand tussen het skyrmion en het antiskyrmion toeneemt.

Voor  $\alpha a \rightarrow 0$  heffen de snelheidsvelden van het skyrmion en het antiskyrmion elkaar precies op, zodat  $E_{kin}^{as}(\alpha, \alpha a \rightarrow 0) = 0$ . Ver van het paar heffen de snelheidsvelden elkaar op. Tussen het skyrmion en het antiskyrmion in zullen de snelheidsvelden elkaar versterken. Hoe verder het skyrmion en het antiskyrmion zich van elkaar bevinden, hoe groter het gebied waarbinnen de snelheidsvelden elkaar versterken en hoe groter de kinetische energie. Als de afstand tussen het skyrmion en het antiskyrmion groot is, benadert de kinetische energie een logaritmische potentiaal.



Figuur 8.6: De kinetische energie van een skyrmion-antiskyrmion paar als functie van de afstand tussen het skyrmion en het antiskyrmion, vergeleken met een logaritmische potentiaal (groen gestreepte curve).

### 8.2.3 Interactie energie

Tot slot berekenen we de interactie energie  $E_{int} = E_{int}^{ss} = E_{int}^{as}$ , waarbij we gebruik maken van  $\mu = 1$ . Het resultaat wordt gegeven door

$$E_{int}(\alpha, \alpha a) = -\frac{\pi}{2}R^2 + \frac{1}{\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} [1 - \tanh^2 x \tanh^2 x']^2 \right. \quad (8.35)$$

$$\left. + (\gamma-1) [\tanh^2 x \tanh^2 x' - \tanh^4 x \tanh^4 x'] \right\} \quad (8.36)$$

De eerste term is divergent voor  $R \rightarrow +\infty$ , maar hangt niet meer af van de variationele parameters  $\alpha$  en  $a$ . We kunnen altijd een constante term bij de energie bijtellen of aftrekken zonder de fysica van het probleem te veranderen, zodat deze term geen probleem vormt. De overblijvende integraal is convergent, maar niet analytisch oplosbaar. We werken eerst de limietgevallen  $\alpha a \rightarrow 0$  en  $\alpha a \rightarrow +\infty$  uit. Voor  $\alpha a \rightarrow +\infty$  moeten

we opnieuw tweemaal de interactie energie van een enkel skyrmion terugvinden.

$$\begin{aligned}
\alpha^2 [E_{int}(\alpha, \alpha a \rightarrow 0) - E_{int}^0] &= 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} [1 - \tanh^4 x]^2 + (\gamma-1) \tanh^4 x [1 - \tanh^4 x] \right\} \\
&= 2\pi \left[ (\beta-1) \left( 2 \frac{26 \ln 2 - 3}{105} \right) + (\gamma-1) \left( \frac{72 \ln 2 - 59}{210} \right) \right] \\
&= 1.79781 \dots (\beta-1) + 3.25848 \dots (\gamma-1)
\end{aligned} \tag{8.37}$$

$$\begin{aligned}
\alpha^2 [E_{int}(\alpha, \alpha a \rightarrow +\infty) - E_{int}^0] &= 2 \times 2\pi \int_0^{+\infty} x dx \left\{ \frac{(\beta-1)}{2} \frac{1}{\cosh^4 x} + (\gamma-1) \frac{\tanh^2 x}{\cosh^2 x} \right\} \\
&= 4\pi \left[ (\beta-1) \left( \frac{4 \ln 2 - 1}{12} \right) + (\gamma-1) \left( \frac{2 \ln 2 + 1}{6} \right) \right] \\
&= 1.85625 \dots (\beta-1) + 4.99784 \dots (\gamma-1)
\end{aligned} \tag{8.38}$$

met  $E_{int}^0 = -\frac{\pi}{2} R^2$ . We hebben de energie ook numeriek uitgewerkt in Mathematica, waarbij we de interactie term gesplitst hebben in een term die afhangt van  $\beta$  en een term die afhangt van  $\gamma$ .

$$E_{int,\beta}(\alpha, \alpha a) = \frac{(\beta-1)}{2\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} x dx [1 - \tanh^2 x \tanh^2 x']^2 \tag{8.39}$$

$$E_{int,\gamma}(\alpha, \alpha a) = \frac{(\gamma-1)}{\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\alpha R} x dx [\tanh^2 x \tanh^2 x' - \tanh^4 x \tanh^4 x'] \tag{8.40}$$

Het resultaat voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 2$  wordt weergegeven in figuur 8.7. We zien duidelijk de invloed van de verschillende termen. Of de interactie energie toeneemt of afneemt bij constante  $\alpha$ , hangt af van de waarden van de interactieconstanten. Als de afstand tussen de skyrmionen afneemt, stijgt de hoeveelheid condensaat van de tweede component eerst, om vervolgens te dalen als de skyrmionen beginnen te overlappen. Dit reflecteert zich in het verloop van  $\alpha^2 E_{int,\beta}(\alpha, \alpha a)$ . Verder wordt de hoeveelheid condensaat van de tweede component meer geconcentreerd als de afstand tussen de skyrmionen afneemt. Hierdoor daalt de bijdrage van de interactie energie tussen de twee componenten. Als  $\gamma < 1$ , is  $\alpha^2 E_{int,\gamma}(\alpha, \alpha a)$  negatief en een stijgende functie van  $\alpha a$ .

Het resulterende verloop van de interactie energie hangt sterk af van de precieze waarden van de interactieconstanten. Als voorbeeld wordt de interactie energie voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  weergegeven in figuur 8.8.

## 8.2.4 Totale energie

De totale energie is gegeven door

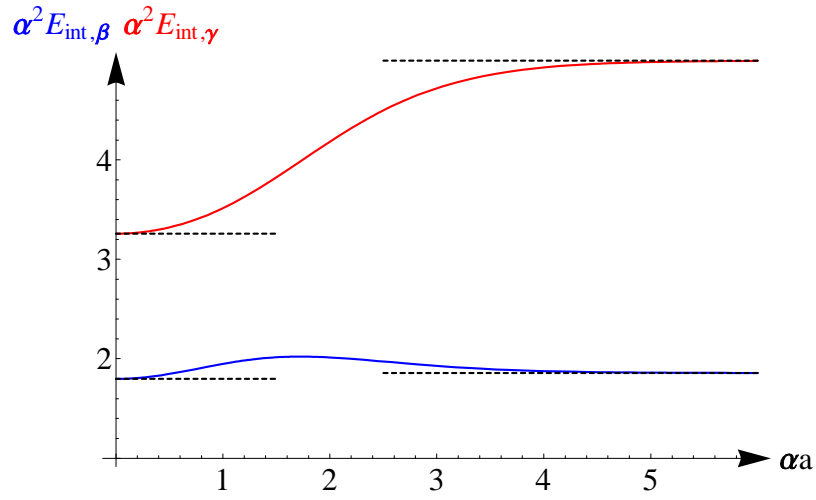
$$E_{tot} = E_{ps} + E_{kin} + E_{int} - 8\pi \ln R + \frac{\pi}{2} R^2 \tag{8.41}$$

en hangt niet meer af van  $R$ .

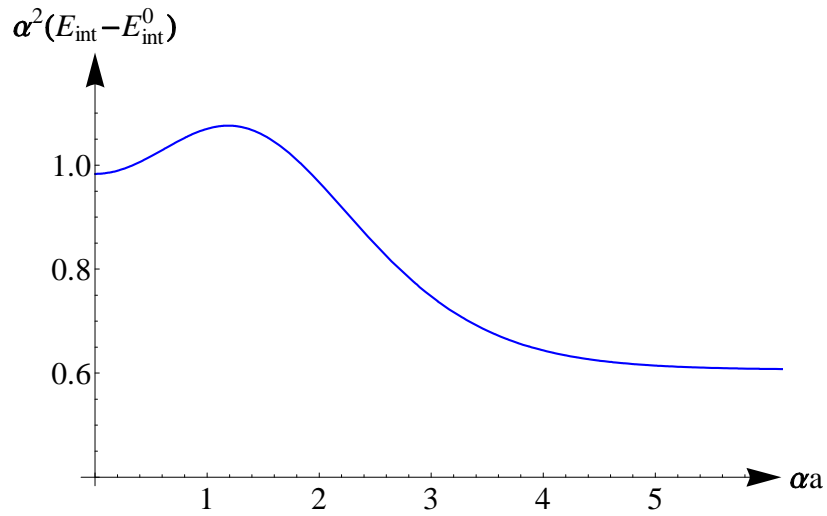
Als voorbeeld hebben we de totale energie van een skyrmion-skyrmion paar en van een skyrmion-anti-skyrmion paar bekeken voor een specifieke waarde van  $\beta$  en  $\gamma$ , namelijk  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ . Deze waarden liggen in het midden van de strook waarbinnen een enkel skyrmion energetisch voordeliger is dan een enkele vortex bij  $\Omega = 0$ , zoals we eerder vonden in hoofdstuk 5. We berekenen de totale energie numeriek in Mathematica als functie van de afstand tussen de skyrmionen en we minimaliseren de energie in functie van de variationele parameter  $\alpha$ .  $\frac{1}{\alpha}$  is een maat voor de grootte van de skyrmionen.

We bekijken eerst het skyrmion-skyrmion paar. De totale energie wordt weergegeven in figuur 8.9 en de minimale waarde van  $\alpha$  in figuur 8.10.

Als de afstand tussen de skyrmionen groot is, domineert de bijdrage van de kinetische energie en stoten de skyrmionen elkaar af. De skyrmion-skyrmion potentiaal neemt minder snel af als functie van  $\alpha a$  dan de logaritmische wet voor de vortex-vortex potentiaal, waardoor skyrmionen elkaar minder sterk afstoten



Figuur 8.7: De interactie energie van een skyrmion paar of een skyrmion-antiskyrmion paar als functie van  $\alpha a$  voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 2$ , gesplitst in de aparte bijdragen van de termen evenredig met  $(\beta - 1)$  en  $(\gamma - 1)$ .



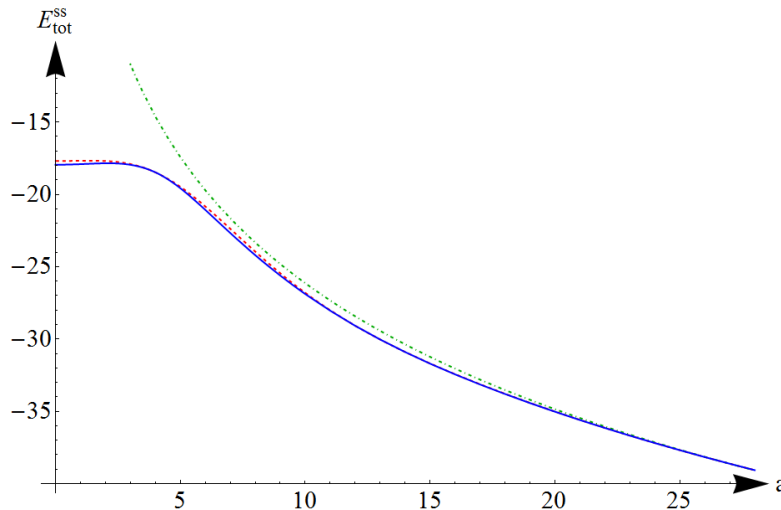
Figuur 8.8: De interactie energie van een skyrmion-skyrmion paar of een skyrmion-antiskyrmion paar als functie van  $\alpha a$  voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ .

dan vortices. Voor  $a \rightarrow +\infty$  gaat de waarde van de variationele parameter naar de waarde van  $\alpha_{skymion}$  voor het geïsoleerde skyrmion ( $\alpha_{skymion} = 0.31$  voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ ), zoals afgeleid in sectie 4.4. Voor grote afstanden tussen de skyrmionen is het duidelijk een goede benadering om met vaste skyrmiongrootte te werken ( $\alpha_{\min} = \alpha_{skymion}$ ).

Als de afstand  $a$  tussen de skyrmionen van de orde van de grootte van de skyrmionen wordt ( $a < \frac{3}{\alpha}$ ), beginnen de skyrmionen elkaar te overlappen. Hierdoor wordt de invloed van de bijdrage van de pseudospin gradiënt en de interactie energie op de potentiaal belangrijk en zal het geen goede benadering meer zijn om met vaste skyrmiongrootte te werken. In vloeibaar helium is de coherentielengte klein en is de fout dus beperkt. In condensaten van ultrakoude gassen kan de coherentielengte echter groot worden, zelfs van de orde van het systeem, en kan het dus belangrijk zijn om de aangepaste skyrmiongrootte in rekening te brengen. De resulterende potentiaal hangt sterk af van de waarden van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ .

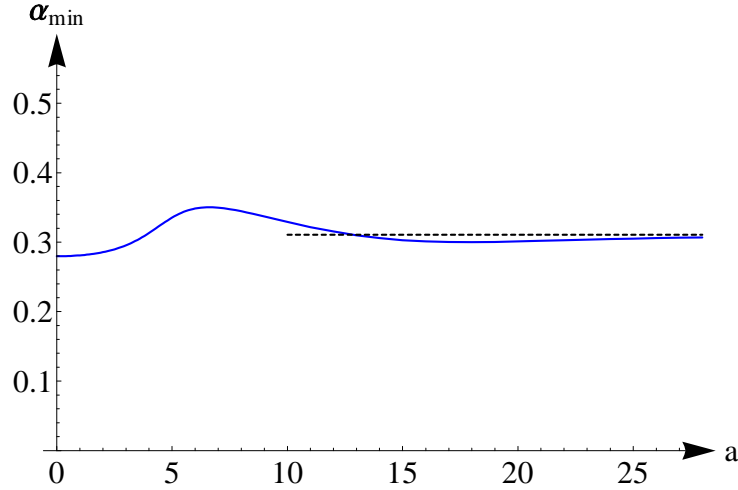
Het precieze verloop van de variationele parameter  $\alpha$  bij  $\alpha a < 3$  hangt af van de som van de interactie energie  $E_{int}^{ss}$  en de pseudospin bijdrage  $E_{ps}^{int}$ . Waar deze som stijgt als functie van  $\alpha a$ , zal  $\alpha$  stijgen en het skyrmion kleiner worden. Dit is logisch, aangezien het energetisch voordelig is om het skyrmion te verkleinen als de interactie energie of de kost om de pseudospins te verbuigen groter wordt. Omgekeerd zal  $\alpha$  dalen (en dus het skyrmion groter worden) waar deze som daalt als functie van  $\alpha a$ . Dit zien we duidelijk terug als we het verloop van  $\alpha_{\min}$  uit figuur 8.10 vergelijken met figuren 8.3 en 8.7.

De resulterende interactiepotentiaal voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  is attractief voor  $\alpha < 3$ . Een skyrmion met windingsgetal  $Q = 2$  (opgevulde vortex met twee circulatiekwanta) kan dus metastabiël zijn, in tegenstelling tot een vortex met twee circulatiekwanta. Dit is te wijten aan het lokale minimum in de interactie energie en aan het minimum in de pseudospin bijdrage bij  $\alpha a = 0$  (zie figuren 8.3 en 8.7). Het is een belangrijk verschil tussen vortices en skyrmionen. Bij vortices zal een kleine perturbatie van een vortex met twee circulatiekwanta ervoor zorgen dat deze splitst in twee vortices met elk één circulatiekwantum. Bij skyrmionen hoeft dit niet het geval te zijn.



Figuur 8.9: Skyrmion-skyrmion potentiaal voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  bij aangepaste skyrmiongrootte (blauwe volle curve) en vaste skyrmiongrootte ( $\alpha = \alpha_{skymion} = 0.31$ , rood gestreepte curve), vergeleken met een logaritmische potentiaal (groene curve). Het aanpassen van de skyrmiongrootte verandert de vorm van de interactiepotentiaal bij kleine afstanden tussen de skyrmionen. Voor grote afstanden tussen de skyrmionen is het een goede benadering om met vaste skyrmiongrootte te werken.

Vervolgens bekijken we het skyrmion-antiskyrmion paar. De totale energie wordt weergegeven in figuur 8.11 en de minimale waarde van  $\alpha$  in figuur 8.12. Een skyrmion en een antiskyrmion trekken elkaar aan. Op grote afstanden stijgt de skyrmion-antiskyrmion energie sneller dan een logaritmische wet, waardoor een skyrmion en een antiskyrmion elkaar sterker aantrekken dan een vortex-antivortex paar. Op korte afstanden ( $\alpha a < 3$ ) verlaagt het aanpassen van de skyrmiongrootte de energie, waardoor de potentiaal



Figuur 8.10: De optimale waarde van de variationele parameter  $\alpha$  voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  (blauwe curve), vergeleken met de optimale waarde voor een enkel skyrmion ( $\alpha = \alpha_{skyrm} = 0.31$ , zwarte stippellijn). Bij kleine waarden van  $a$  zien we duidelijk de invloed van de overlap tussen de skyrmionen op de skyrmiongrootte.

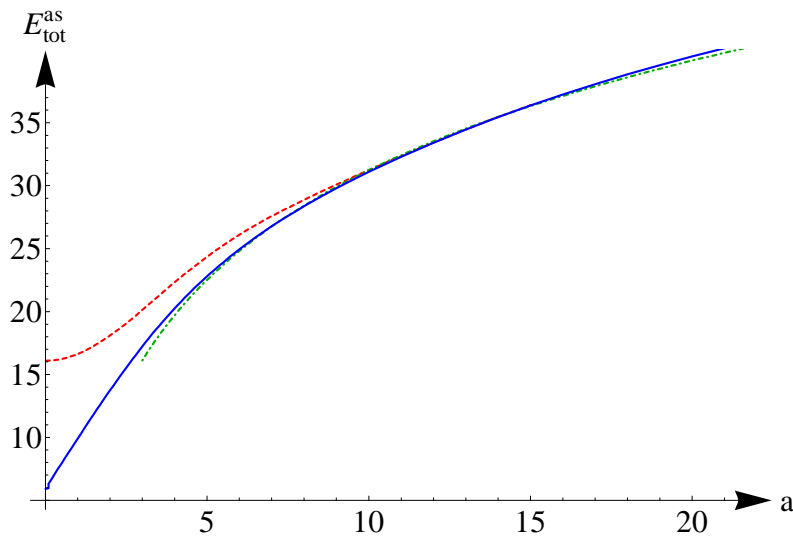
sterker attractief wordt. Op korte afstanden wordt de invloed van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  op de totale energie groter, wat de skyrmion-antiskyrmion potentiaal duidelijk kan wijzigen ten opzichte van de vortex-antivortex potentiaal.

Hoe kleiner de afstand tussen de skyrmionen, hoe groter  $\alpha_{\min}$  en hoe kleiner het skyrmion. Dit is te wijten aan het feit dat de snelheidsvelden van het skyrmion en het antiskyrmion elkaar opheffen op grote afstand van het paar. Hoe kleiner de afstand tussen beide skyrmionen, hoe kleiner het gebied waarin de snelheid groot genoeg zal zijn om een substantiële bijdrage te leveren tot de kinetische energie. Daardoor is ook het gebied kleiner waarbinnen het energetisch voordeliger is om de bewegende component 1 om te zetten naar stilstaande component 1 en wordt het skyrmion kleiner.

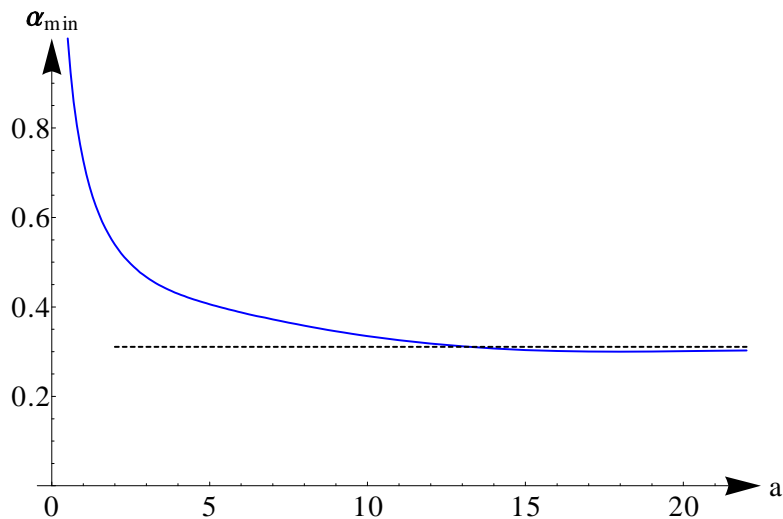
Als algemene conclusie kunnen we stellen dat het aanpassen van de grootte van het skyrmion de skyrmion-skyrmion en de skyrmion-antiskyrmion potentiaal enkel aanpast voor kleine afstanden tussen de skyrmionen ( $\alpha_{skyrm}a < 3$ ). Voor  $\alpha_{skyrm}a > 3$  is het een goede benadering om de grootte van de skyrmionen gelijk te kiezen aan de grootte  $\alpha_{skyrm}$  van een geïsoleerd skyrmion.

Op grote afstanden zijn beide potentialen sterker attractief dan de logaritmische wet die we vonden voor vortices. Aangezien het effect in beide gevallen in dezelfde richting werkt, is het gerelateerd aan het dichtheidsprofiel en niet aan het snelheidsprofiel. Het is dus waarschijnlijk te wijten aan de aanwezigheid van de tweede component in de kern van de vortices van de eerste component, al kan het ook te wijten zijn aan een numerieke onnauwkeurigheid.

De som van de pseudospin bijdrage en de kinetische energie in het geval van skyrmionen is gelijk aan de som van de bijdrage van de kwantumdruk en de kinetische energie in het geval van vortices, als we dezelfde waarde voor de variationele parameter  $\alpha$  kiezen. Enkel de uitdrukking voor de interactie energie is essentieel verschillend. Op grote afstanden zorgt deze voor een andere optimale waarde van  $\alpha$  en dus een andere energie van het systeem. Op kleine afstanden zal het verloop van de interactie energie als functie van  $a$  een belangrijke invloed hebben op de uiteindelijke potentiaal. Dit kan op kleine afstanden zorgen voor duidelijke verschillen tussen de skyrmion-(anti)skyrmion en de vortex-(anti)vortex potentiaal.



Figuur 8.11: Skyrmion-antiskyrmion potentiaal voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  bij aangepaste skyrmiongrootte (blauwe volle curve) en vaste skyrmiongrootte ( $\alpha = \alpha_{skyrm} = 0.31$ , rood gestreepte curve), vergeleken met een logaritmische potentiaal (groen gestreept). Het aanpassen van de skyrmiongrootte verandert duidelijk de potentiaal tussen een skyrmion en een antiskyrmion voor  $a < 10$ . Op korte afstanden wordt deze potentiaal sterker attractief. Op grote afstanden daalt de potentiaal minder snel dan een logaritmische wet.



Figuur 8.12: De waarde van  $\alpha$  in het energiminimum als functie van de afstand tussen een skyrmion en een antiskyrmion bij  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ , vergeleken met de waarde van  $\alpha$  voor een geïsoleerd skyrmion ( $\alpha = \alpha_{skyrm} = 0.31$ , zwarte stippellijn). Hoe dichter de skyrmionen bij elkaar komen, hoe groter  $\alpha$  en hoe kleiner het skyrmion.





## Deel IV

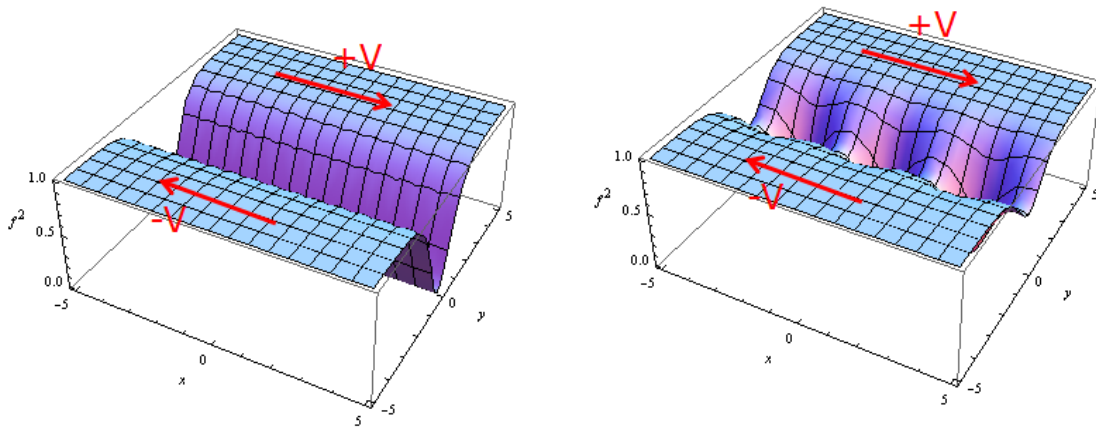
# Meerdere topologische excitaties



## Hoofdstuk 9

# Overgang van een rij vortices naar een fasesliplijn

We bekijken de grens tussen de twee lagen van een ééncomponentcondensaat die zich elk met een verschillende snelheid voortbeweget. Er zijn twee verschillende situaties die zich zouden kunnen voordoen. Ofwel wordt de grens bepaald door een rij vortices, ofwel door een fasesliplijn ('phase slip line', PSL). Dit wordt weergegeven in figuur 9.1. Een fasesliplijn is een 'kloof' in het condensaat waarlangs de dichtheid nul wordt. Het aantal vortices per lengte-eenheid wordt bepaald door de voorwaarde dat de resulterende snelheid op oneindig bepaald is door de respectievelijke snelheden van de verschillende lagen. Een fasesliplijn heeft als nadeel dat er meer condensaat weggeboord moet worden, wat energie kost. De condensaatdichtheid van de fasesliplijn moet echter minder variëren dan in het geval van de vortices, zeker als het aantal vortices per lengte-eenheid groot is, wat dan weer in het voordeel van de fasesliplijn spreekt. We bekijken hier of er een kritische snelheid is waarbij de fasesliplijn energetisch voordeliger wordt dan de rij vortices. Dit onderzoek werd eerder gedaan door Ben Van Duppen in zijn bachelorthesis. Daarom zullen we slechts een overzicht geven van de belangrijke stappen en resultaten. In het volgende hoofdstuk zullen we deze berekeningen uitbreiden tot een tweecomponentcondensaat en bekijken of er een kritische snelheid is waarbij een rij skyrmionen overgaat in een skyrmion-fasesliplijn. De berekeningen en resultaten van dit hoofdstuk zullen als achtergrond en vergelijkingspunt dienen.



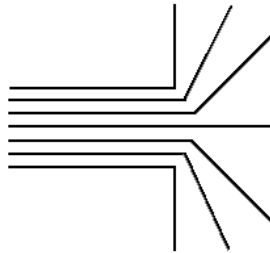
Figuur 9.1: We stellen ons de vraag of er een kritische snelheid  $V$  bestaat waarbij een rij vortices (links) overgaat in een fasesliplijn (rechts).

## 9.1 Injectie van condensaat

De beschouwingen in dit hoofdstuk zijn volledig theoretisch, maar kunnen wel gekoppeld worden aan een reëel fysisch systeem waarin de beschouwde situatie zich kan voordoen: het injecteren van condensaat in een medium van stilstaand condensaat. De injectie gebeurt door een smalle opening in de wand van de 'doos' (of val) met condensaat. Voor een puur irrotationale stroming, zou het snelheidsprofiel eruit zien zoals in figuur 9.2. In dat geval zal de snelheid echter divergeren rond de hoeken van de opening, wat fysisch niet mogelijk is. De oplossing is, net zoals in het geval van een vortex in een roterend condensaat, gegeven door het maken van een 'gat' in het condensaat waar de dichtheid nul wordt.

Welke vorm zal deze oplossing aanemen? Daarvoor gaan we even terug naar de klassieke mechanica. In klassieke fluïda zal de ingestuurde stroom zich door het stilstaande medium propageren als een soort jet. De scheidingslaag tussen de jet en het stilstaande medium is instabiel (de zogenaamde Kelvin-Helmholz instabiliteit), wat aanleiding zal geven tot het vormen van vortex-antivortex paren aan weerszijden van de jet. Deze paren worden gevormd op regelmatige afstanden van elkaar langs de scheidingslijn, zoals weergegeven in figuur 9.3. Aan de ene kant van de jet bekomen we dus een rij vortices, aan de andere kant een rij antivortices. In de klassieke hydrodynamica wordt dit een 'Von Karman-straat' genoemd. In de vortexrij zullen de vortices nog met elkaar interageren, wat er bvb. voor kan zorgen dat de vortices beginnen af te wijken van de rechte. Verder zullen de vortices zich ook van de opening weg bewegen.

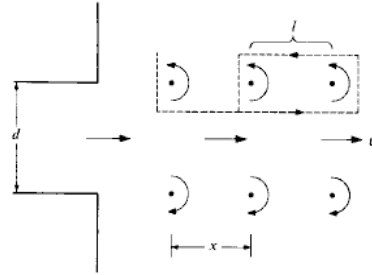
Om te bekijken hoe deze oplossing er in een Bose-Einstein condensaat uitziet, bekijken we de fase van het condensaat. Deze bepaalt de superfluïde snelheid via  $v_s = \nabla\theta$ . Om de analyse te vereenvoudigen, gaan we uit van een ruimte waarin aan één kant het condensaat in beweging is met een constante snelheid, terwijl het condensaat aan de andere kant stilstaat. Dit komt overeen met één van de scheidingslijnen. De fase verloopt in dat geval zoals gegeven in figuur 9.4. In het bewegende condensaat heerst een constante fasegradiënt, terwijl in het stilstaande condensaat de fase nul is. In een Bose-Einstein condensaat moet de fase continue zijn. Er zijn twee manieren om een continue fase te bekomen. De ene wijze is door de lijnen van constante fase zodanig te verbuigen dat er op regelmatige afstanden vortices ontstaan, analoog aan het klassieke geval. Deze vortices zijn punten waar de fase singulier is en de dichtheid dus naar nul moet gaan. De andere wijze is door de dichtheid op de scheidingslijn nul te kiezen. Dit brengt ons tot de twee gevallen die we zullen beschouwen: de rij vortices en de fasesliplijn.



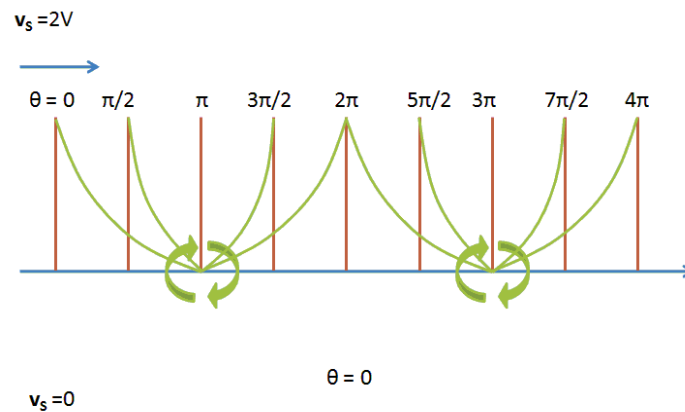
Figuur 9.2: Stroomlijnen van een irrotationale stroom die uit een gat in de wand stroomt. Aan de hoekpunten van het gat zal de snelheid divergeren en kunnen er vortices gevormd worden [4].

## 9.2 Fasesliplijn

Als eerste bekijken we de fasesliplijn, aangezien deze exact analytisch oplosbaar is (in tegenstelling tot de vortexrij). Om een symmetrische situatie te verkrijgen, voeren we een Galileitransformatie uit. De nieuwe waarnemer beweegt zich met de helft van de snelheid en in dezelfde richting als het geïnjecteerde condensaat. Aan weerszijden van het scheidingsvlak beweegt het condensaat na deze transformatie met dezelfde snelheid  $V$ , maar in tegengestelde zin. We kiezen als scheidingsvlak het  $xz$ -vlak en we kiezen de  $x$ -as parallel met de snelheidsvector. Verder nemen we aan dat het condensaat homogeen is in  $z$ -richting, wat het probleem reduceert tot twee dimensies ( $x$  en  $y$ ). Dit laat ons toe een snelheidsvector en een probeerfunctie voor de



Figuur 9.3: Vorming van vortices op de scheidingslijn tussen stilstaand en bewegend condensaat bij injectie van condensaat vanuit een gat in de wand [4].



Figuur 9.4: Lijnen van constante fase op de grens tussen stilstaand en bewegend condensaat. Het bewegend condensaat vertoont een constante fasegradiënt (rode lijnen van constante fase). Het stilstaand condensaat heeft fase nul. De fase moet continu zijn in een condensaat. Ofwel moet dus de dichtheid nul worden op de scheidingslijn (fasesliplijn), ofwel moeten de lijnen van constante fase zodanig verbogen worden dat de discontinuïteit geconcentreerd wordt in de vortexkernen (groene lijnen).

dichtheid te definiëren. Het snelheidsprofiel is gegeven door

$$\mathbf{v}_s = \begin{cases} V\mathbf{e}_x & y > 0 \\ -V\mathbf{e}_x & y < 0 \end{cases} \quad (9.1)$$

Merk op dat de superfluïde snelheid ongedefinieerd is in  $y = 0$ , aangezien in  $y = 0$  de condensaatdichtheid nul is. Het dichtheidsprofiel is volledig analoog aan het geval van een condensaat aan een wand uit 1.2.2. We kiezen dan ook als probeerdichtheidsfunctie

$$f = \tanh(\alpha y) \quad (9.2)$$

Het snelheids- en dichtheidsprofiel wordt weergegeven in figuur 9.1 (links). De energie van de fasesliplijn wordt gegeven door de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal (3.12).

$$E_{GP} = \int_{-H}^H dx \int_0^Y dy \left\{ |\nabla f|^2 + f^2 v_s^2 - \left( \mu - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 \right\} \quad (9.3)$$

We hebben hier onze integratiegrenzen anders gekozen dan in het geval van één of twee excitaties. De energie van het systeem is gelijk aan weerszijden van de y-as. Het is dus voldoende om te integreren tussen  $y = 0$  en  $y = Y \rightarrow +\infty$ . Het snelheids- en dichtheidsprofiel is volledig symmetrisch in x-richting. Het resultaat zal dus op een schalingsfactor na niet afhangen van de keuze van de integratiegrenzen van de integratie over x. We kiezen als integratiegrenzen  $-H$  en  $+H$ . Net als in de voorgaande hoofdstukken, kunnen we nu de aparte bijdragen tot de energie berekenen voor  $Y \rightarrow +\infty$ . Waar nodig, trekken we divergente termen af van de totale energie.

De eerste bijdrage is de bijdrage van de kwantumdruk.

$$E_{qp}^{PSL} = 2H \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^4(\alpha y)} \right\} = \frac{4}{3} H \alpha \quad (9.4)$$

De kinetische energie wordt gegeven door

$$E_{kin}^{PSL} - E_{kin}^0 = 2H \int_0^{+\infty} dy \left\{ \tanh^2(\alpha y) V^2 - V^2 \right\} = -\frac{2HV^2}{\alpha} \quad (9.5)$$

met  $E_{kin}^0 = 2HYV^2$ . De laatste term is de interactie energie. Het integrandum van de interactie energie wordt gegeven door

$$\mathcal{E}_{int}^{PSL} = - \left( \mu - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 \approx - \left( \mu_{bulk} - \frac{1}{2} f^2 \right) f^2 \quad (9.6)$$

We moeten hier echter een andere waarde voor  $\mu_{bulk}$  gebruiken. Om deze te bepalen, berekenen we de energie van een homogeen condensaat met  $f = 1$  en het snelheidsprofiel uit (9.1). We gebruiken hierbij uitdrukking (9.3) voor de energie.

$$\begin{aligned} E_0 &= \int_{-H}^H dx \int_0^{+Y} dy \left\{ f^2 V - \mu f^2 + \frac{1}{2} f^4 \right\} \\ &= 2HY \left( f^2 V - \mu f^2 + \frac{1}{2} f^4 \right) \end{aligned} \quad (9.7)$$

We moeten de chemische potentiaal  $\mu$  zodanig kiezen dat de energie minimaal is voor  $f = 1$  (met  $f$  een constante functie).

$$0 = \frac{\partial E_0}{\partial f} = 4HY f \{ V^2 - \mu + f^2 \} \quad (9.8)$$

$$\Leftrightarrow \mu = V^2 + f^2 \quad (9.9)$$

Om ervoor te zorgen dat  $E_0$  minimaal is bij  $f = 1$ , moeten we dus

$$\mu = V^2 + 1 \quad (9.10)$$

kiezen. Dit is de correcte bulkwaarde  $\mu_{bulk}$  voor ons systeem. Het snelheidsveld heeft een duidelijke invloed op de waarde van de chemische potentiaal, via de extra term  $V^2$  in  $\mu_{bulk}$ . Als we deze waarde invullen in (9.6), bekomen we

$$\begin{aligned} E_{int}^{PSL} - E_{int}^0 &= 2H \int_0^{+\infty} dy \left[ V^2 \frac{1}{\cosh^2(\alpha y)} + \frac{1}{2 \cosh^4(\alpha y)} \right] \\ &= \frac{2HV^2}{\alpha} + \frac{2H}{3\alpha} \end{aligned} \quad (9.11)$$

met  $E_0^{int} = -2HY (V^2 + \frac{1}{2})$ . We kunnen nu alle termen samenvoegen tot een uitdrukking voor de totale energie van de fasesliplijn.

$$\begin{aligned} E_{tot}^{PSL} &= E_{GP}^{PSL} - E_0 = E_{qp}^{PSL} + (E_{kin}^{PSL} - E_{kin}^0) + (E_{int}^{PSL} - E_{int}^0) \\ &= \frac{2H}{3} \left[ 2\alpha + \frac{1}{\alpha} \right] \end{aligned} \quad (9.12)$$

Deze uitdrukking kunnen we minimaliseren door ze af te leiden naar  $\alpha$ .

$$0 = \frac{\partial E_{tot}^{PSL}}{\partial \alpha} = \frac{2H}{3} \left[ 2 - \frac{1}{\alpha^2} \right] \quad (9.13)$$

$$\Leftrightarrow \alpha = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (9.14)$$

De variationele parameter is dus onafhankelijk van  $V$ . Dit resultaat is te verwachten, aangezien de kromming in alle referentiestelsels hetzelfde zou moeten zijn en de fasesliplijn equivalent is met een bewegende oneindig hoge wand. De waarde van  $\alpha$  is ook gelijk aan de waarde die we in 1.2.2 hebben berekend voor een condensaat aan een wand. De waarde van  $\alpha$  kunnen we nu terug invullen in  $E_{tot}^{PSL}$ .

$$\frac{E_{tot}^{PSL}}{2H} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \quad (9.15)$$

De veranderde bulkwaarde van de chemische potentiaal zorgt er hier voor dat ook de totale energie niet afhangt van de snelheid.

### 9.3 Rij vortices

Bij de rij vortices voeren we dezelfde Galileï transformatie uit die het systeem symmetrisch maakt over de scheidingslijn. Om de rij vortices te bekijken, moeten we echter nog twee benaderingen invoeren. Ten eerste bekijken we enkel vortices die zich niet te dicht bij de rand van het systeem bevinden (bvb. de opening waarlangs het condensaat geïnjecteerd wordt). Hierdoor kan de situatie benaderd worden alsof ze afkomstig is van een oneindige rij vortices en hoeven we geen rekening te houden met eventuele randeffecten. Merk op dat we ook bij de fasesliplijn geen rekening hebben gehouden met randeffecten. De tweede benadering is dat we ons ook weer niet te ver van de rand van het systeem bevinden (of de opening waarlangs het condensaat geïnjecteerd wordt). Onder invloed van het snelheidsveld van de andere vortices zullen de vortices ook loodrecht op de scheidingslijn bewegen, wat een asymmetrische situatie creëert. Dicht bij de opening waarlangs het condensaat geïnjecteerd wordt, zal dit effect nog beperkt zijn. Daardoor kunnen we uitgaan van een oneindige rij vortices die stil staat in ons gekozen assenstelsel. Net zoals bij de fasesliplijn, zullen we de energie per segment van lengte  $2H$  in x-richting berekenen. In dit geval zullen we  $2H$  echter zodanig moeten vastleggen, dat een segment een geheel aantal vortices bevat (in de praktijk één vortex).

Het snelheidsprofiel van een oneindige rij stilstaande klassieke vortices wordt afgeleid in [22]. Als we de snelheid op oneindig grote afstand van de rij vortices gelijk aan  $V$  kiezen, wordt het snelheidsprofiel gegeven door

$$v_{s,x} = V \frac{\sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \quad (9.16)$$

$$v_{s,y} = -V \frac{\sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \quad (9.17)$$

De snelheid divergeert naar mate men een vortex benadert en tussen twee vortices is de snelheid nul. Vlakbij de vortices zal de snelheid sterk variëren, maar ver van de vortexrij benadert de snelheid steeds meer het homogene profiel uit (9.1). Verder is het snelheidsveld periodisch in x-richting met periode  $\frac{2\pi}{2V} = \frac{\pi}{V}$ . Een voor de hand liggende keuze voor de integratiegrenzen in x wordt dus gegeven door  $\{-H, +H\} = \{-\frac{\pi}{2V}, \frac{\pi}{2V}\}$ .

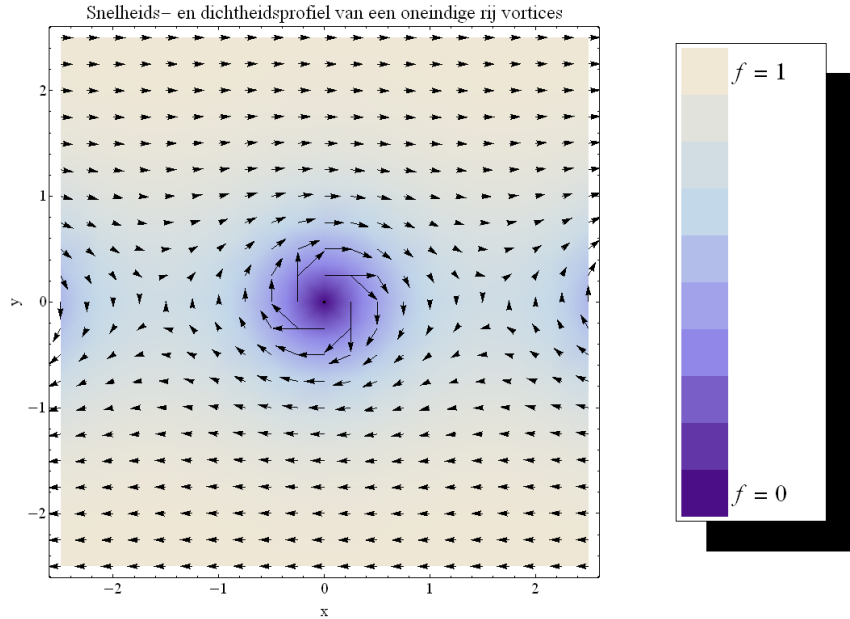
Nu we het snelheidsprofiel hebben vastgelegd, moeten we nog een voorstel doen voor het dichtheidsprofiel. Voor één vortex is dit gegeven door  $f = \tanh(\alpha r) = \tanh\left(\alpha\sqrt{x^2 + y^2}\right)$ . Voor de faseslijp is dit gegeven door  $f = \tanh(\alpha y)$ . We willen dit profiel van de tangens hyperbolicus behouden, zeker in y-richting, maar we moeten dan nog de juiste periodiciteit in x-richting introduceren. Een voorstel dat aan hieraan voldoet is

$$f = \tanh\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right) \quad (9.18)$$

Dit profiel is weergegeven in figuur. Het heeft de juiste periodiciteit in x-richting en verloopt in y-richting volgens het gewenste tangens hyperbolicus profiel. Verder gaat het in de limiet voor kleine snelheden naar het profiel van één enkele vortex.

$$\lim_{V \rightarrow +\infty} f = \tanh\left(\alpha\sqrt{x^2 + y^2}\right) = \tanh(\alpha r) \quad (9.19)$$

De combinatie van het dichtheids- en het snelheidsprofiel wordt weergegeven voor  $V = 1$  in figuur 9.3.



Nu we een snelheids- en het dichtheidsprofiel hebben voorgesteld, kunnen we de energie van het systeem berekenen. Deze wordt gegeven door (9.3). We berekenen de aparte termen voor een groot condensaat, waarbij we de divergenties voor  $Y \rightarrow +\infty$  afzonderen en waar mogelijk reeds de limiet  $Y \rightarrow +\infty$  nemen. Verder voeren we telkens de substitutie  $\hat{x} = Vx$  en  $\hat{y} = Vy$  uit en laten we de tildes weg. Deze berekening is volledig analoog aan de berekeningen in hoofdstuk 3. Daarom geven we hier enkel de resultaten.

We beginnen met de energiebijdrage te wijten aan de kwantumdruk.

$$E_{qp}^{vrij} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\left(\frac{\alpha}{V}\right)^2}{\cosh^4\left(\frac{\alpha}{V}\sqrt{\sin^2 x + y^2}\right)} \left[ \frac{\sin^2 x \cos^2 x + y^2}{\sin^2 x + y^2} \right] \right\} \quad (9.20)$$



Vervolgens berekenen we de kinetische energie uit het snelheidspatroon in (9.16) en (9.17), met  $E_{kin}^0 = \pi Y V$ .

$$E_{kin}^{vrij} - E_{kin}^0 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right) \left[ \frac{\sinh^2(2y) + \sin^2(2x)}{[\cosh(2y) - \cos(2x)]^2} \right] - 1 \right\} \quad (9.21)$$

De laatste term is de interactie energie, waarbij we de waarde voor  $\mu$  uit (9.10) gebruiken. Verder kiezen we  $E_{int}^0 = \frac{\pi}{V} Y (V^2 + \frac{1}{2})$ .

$$E_{int}^{vrij} - E_{int}^0 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left[ \frac{1}{\cosh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} + \frac{1}{2V^2} \frac{1}{\cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right] \quad (9.22)$$

Als we alle termen bij elkaar optellen, bekomen we de totale energie van de rij vortices.

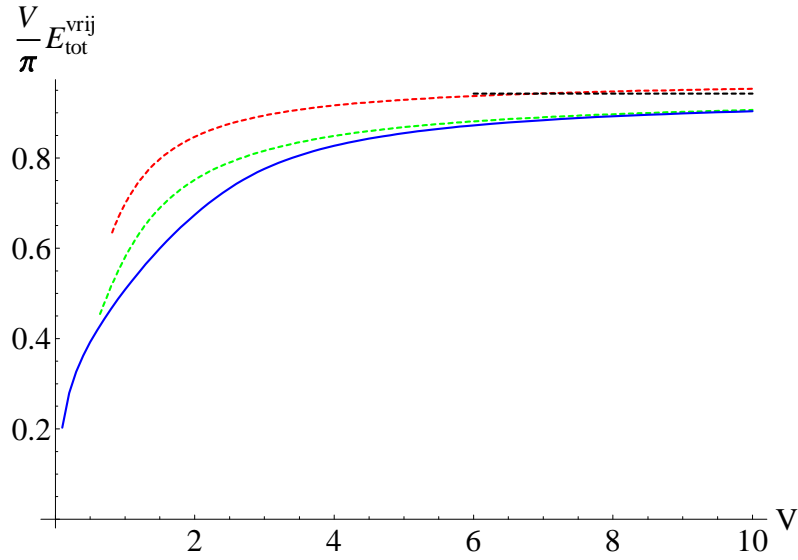
$$\begin{aligned} E_{tot}^{vrij} \left( V, \frac{\alpha}{V} \right) &= E_{GP}^{vrij} - E_0 = E_{qp}^{vrij} + \left( E_{kin}^{vrij} - E_{kin}^0 \right) + \left( E_{int}^{vrij} - E_{int}^0 \right) \\ &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\left( \frac{\alpha}{V} \right)^2}{\cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \left[ \frac{\sin^2 x \cos^2 x + y^2}{\sin^2 x + y^2} \right] \right. \\ &\quad \left. + \tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right) \left[ \frac{\sinh^2(2y) + \sin^2(2x)}{[\cosh(2y) - \cos(2x)]^2} - 1 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2V^2} \frac{1}{\cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right\} \end{aligned} \quad (9.23)$$

We kunnen nu de optimale waarde van de variationele parameter bepalen door de energie te minimaliseren. Aangezien de integralen niet analytisch uitwerkbaar zijn en de afhankelijkheid van het integrandum van  $\alpha$  niet triviaal is, hebben we dit uitgewerkt in Mathematica.

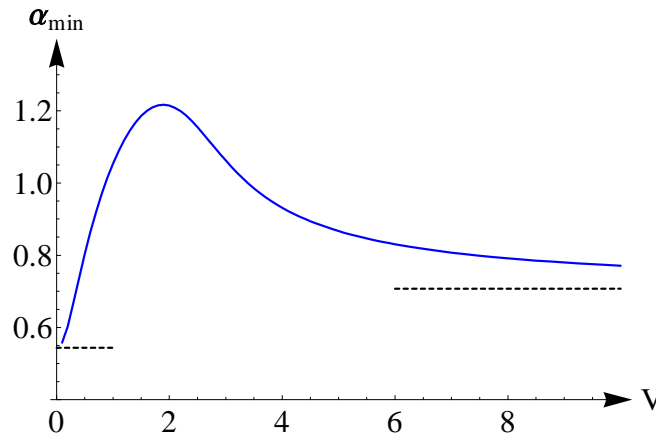
### 9.3.1 Bespreking

De energie van de rij vortices per lengte-eenheid (dus niet per vortex) ten opzichte van een homogeen condensaat met uniforme dichtheid en snelheid  $V$  wordt weergegeven in figuur 9.5, de optimale waarde van de variationele parameter  $\alpha$  in figuur 9.6. De energie van de rij vortices neemt duidelijk toe als de snelheid toeneemt. In de limiet voor  $V \rightarrow +\infty$  gaat de energie naar de waarde voor de fasesliplijn, maar deze wordt nooit bereikt. De waarde van  $\alpha$  voor  $V \rightarrow 0$  is gelijk aan de waarde voor één enkele vortex. Voor toenemende snelheid stijgt  $\alpha$  naar een maximum  $\alpha = 1.25$  rond  $V = 1.8$ . Voorbij dit maximum daalt de waarde van  $\alpha$ . In de limiet  $V \rightarrow +\infty$  wordt  $\alpha$  gelijk aan de waarde  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  voor de fasesliplijn of een condensaat aan een wand. Uit de resultaten voor de minimale energie blijkt verder nog dat het belangrijk is om met variabele vortexgrootte te werken.

Er zijn verschillende bijdragen tot het energieverval tussen de fasesliplijn en de rij vortices. De bijdrage van de kwantumdruk spreekt in het voordeel van de vortices, aangezien de dichtheid van een rij vortices slechts rond enkele specifieke punten gevarieerd moet worden, in plaats van langs een hele lijn. De kinetische energie spreekt in het voordeel van de fasesliplijn, aangezien er bij de rij vortices meer bewegend condensaat aanwezig is, zeker tussen de vortices in. De interactie energie spreekt in het voordeel van de vortices. Het kost minder energie om condensaat te vernietigen in enkele singulariteiten langs de vortexrij dan om het condensaat te vernietigen langs de volledige vortexrij. De totale energiebalans spreekt in het voordeel van de rij vortices, hoewel het energieverval steeds kleiner wordt als de snelheid groter wordt.



Figuur 9.5: De energie per lengte-eenheid van een oneindige rij vortices als functie van de snelheid  $V$  op oneindig grote afstand van de vortices (blauwe curve), vergeleken met de energie van de faseslijp (zwarte stippellijn). De energie van de rij vortices convergeert naar de energie van de faseslijp, maar bereikt deze nooit. Verder wordt ook de energie bij vaste vortexgrootte weergegeven (rood:  $\alpha = \alpha_{\text{vort}}$ , groen:  $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ). We zien dat het variationeel aanpassen van de vortexgrootte een grote invloed heeft op de energie van de rij vortices.



Figuur 9.6: De waarde van de variationele parameter  $\alpha$  in het energiminimum van een oneindige rij vortices als functie van de snelheid  $V$  op oneindig grote afstand van de vortexrij. Voor  $V \rightarrow 0$  gaat  $\alpha_{\text{min}}$  naar de waarde voor één enkele vortex. Voor  $V \rightarrow +\infty$  gaat  $\alpha_{\text{min}}$  naar de waarde  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  voor een condensaat aan een wand of een faseslijp.

# Hoofdstuk 10

## Overgang van een rij skyrmionen naar een fasesliplijn

### 10.1 Inleiding

In het voorgaande hoofdstuk onderzochten we het gedrag van een ééncomponentenscondensaat op de grens tussen twee lagen die zich elk met een verschillende snelheid voortbewegen. We bestudeerden de oneindige rij vortices en de fasesliplijn. Vervolgens vergeleken we beide situaties, waarbij bleek dat de rij vortices altijd energetisch voordeliger is dan de fasesliplijn. De fasesliplijn is het limietgeval, maar dit wordt nooit bereikt. In een tweecomponentenscondensaat kunnen we niet alleen vortices vormen, maar ook skyrmionen. Op de grens tussen twee lagen van de ene component met een verschillende snelheid, zouden we dus ook een oneindige rij skyrmionen kunnen vormen, via het opvullen van de kernen van de vortices met de tweede component. Bij de fasesliplijn zouden we ons een gelijkaardige situatie kunnen indenken: een fasesliplijn van de eerste component, waarvan de kern opgevuld is met de tweede component. Dit noemen we verder een skyrmion-fasesliplijn (sPSL). Hier zullen we de eigenschappen van de oneindige rij skyrmionen en van de skyrmion-fasesliplijn onderzoeken. Vervolgens vergelijken we beide situaties met elkaar, waarbij we nagaan of er waarden van de interactieconstanten en het snelheidsverschil  $2V$  tussen de lagen bestaan waarvoor de skyrmion-fasesliplijn energetisch voordeliger is dan de oneindige rij skyrmionen.

### 10.2 Skyrmion-fasesliplijn

We beginnen met de energie van de skyrmion-fasesliplijn in een homogeen condensaat, aangezien deze analytisch uitwerkbaar is. Voor de beschrijving van het systeem vertrekken we vanuit de beschrijving van de gewone fasesliplijn. We maken dezelfde keuze voor het assenstelsel en we nemen aan dat het condensaat homogeen is in  $z$ -richting. Het snelheids- en dichtheidsprofiel van de eerste component is dan gelijk aan dat van de gewone fasesliplijn. De uitdrukkingen nemen we over uit (9.1) en (9.2).

$$\mathbf{v}_{s,1} = \begin{cases} V\mathbf{e}_x & y > 0 \\ -V\mathbf{e}_x & y < 0 \end{cases} \quad (10.1)$$

$$f_1 = \tanh(\alpha y) \quad (10.2)$$

De tweede component heeft in dit stelsel snelheid nul,  $\mathbf{v}_{s,2} = 0$ . Het dichtheidsprofiel van de tweede component is zodanig dat de totale dichtheid constant blijft ( $f = f_1^2 + f_2^2 = 1$  in onze dimensieloze notatie).

$$f_2 = \sqrt{1 - \rho_2^2} = \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha y)} \quad (10.3)$$

Deze notatie kunnen we nu omzetten naar onze pseudospin notatie. Hiervoor moeten we de fasehoeken  $\theta_1$  en  $\theta_2$  kennen, waaruit we  $\theta_T = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$  en  $\phi = \theta_2 - \theta_1$  kunnen berekenen. We kennen  $\theta_1$  en  $\theta_2$  niet, maar wel de gradiënten van deze hoeken:

$$\mathbf{v}_{s,i} = \nabla\theta_i \quad (10.4)$$

$$\Rightarrow \nabla\theta_2 = 0, \nabla\theta_1 = \begin{cases} V\mathbf{e}_x & y > 0 \\ -V\mathbf{e}_x & y < 0 \end{cases} \quad (10.5)$$

Hieruit kunnen we dus ook de gradiënten van  $\theta_T$  en  $\phi$  berekenen.

$$\nabla\theta_T = \begin{cases} \frac{V}{2}\mathbf{e}_x & y > 0 \\ -\frac{V}{2}\mathbf{e}_x & y < 0 \end{cases} \quad (10.6)$$

$$\nabla\phi = \begin{cases} -V\mathbf{e}_x & y > 0 \\ V\mathbf{e}_x & y < 0 \end{cases} \quad (10.7)$$

Aangezien we om de energie te berekenen enkel gradiënten van  $\theta_T$  en  $\phi$  nodig hebben, is dit voldoende.

We kunnen nu uit de dichtheden  $f_1$  en  $f_2$  de cosinus en sinus van de mixing angle  $\alpha_{mix}$  bepalen, zoals we dit eerder voor het skyrmion reeds hebben toegepast.

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh(\alpha y) \\ \sqrt{1 - \tanh^2(\alpha y)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh(\alpha y) \\ \frac{1}{\cosh(\alpha y)} \end{pmatrix} \quad (10.8)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \cos(\alpha_{mix}) = \cos^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2\tanh^2(\alpha y) - 1 \\ \sin(\alpha_{mix}) = 2\cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right)\sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2\frac{\tanh(\alpha y)}{\cosh(\alpha y)} = 2\frac{\sinh(\alpha y)}{\cosh^2(\alpha y)} \end{cases} \quad (10.9)$$

De totale dichtheid wordt gegeven door  $f = 1$ . De volgende stap is het bepalen van de verschillende bijdragen tot de variationele energie. Herinner uit (4.5) dat voor een condensaat dat homogeen is in  $z$ -richting geldt dat

$$\begin{aligned} E_{GP} &= \int_{-H}^H dx \int_0^{+\infty} dy \{ \mathcal{E}_{qp} + \mathcal{E}_{ps} + \mathcal{E}_{kin} + \mathcal{E}_{int} + \mathcal{E}_{magn} \} \\ &= \int_{-H}^H dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ (\nabla f)^2 + \frac{f^2}{4} (\nabla \mathbf{S})^2 + f^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 - f^2 \left( \mu - \frac{1}{2} f^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{f^4}{4} [(\beta - 1)(1 - S_z) + (\gamma - 1)(1 - S_z^2)] \right\} \end{aligned} \quad (10.10)$$

met  $E_{GP}$  de energie per lengte-eenheid (in  $z$ -richting). De integratiegrenzen hebben we overgenomen uit de berekening voor de gewone fasesliplijn. De bijdrage  $\mathcal{E}_{qp}^{sPSL}$  van de kwantumdruk valt weg, omdat de totale dichtheid  $f$  constant is. We geven hier enkel de resultaten voor  $Y \rightarrow +\infty$ , aangezien de berekening volledig analoog is aan de berekeningen voor een geïsoleerd skyrmion in hoofdstuk 4.

- Pseudospin bijdrage:

$$\begin{aligned} E_{ps}^{sPSL} &= \int_{-H}^H dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\alpha^2}{\cosh^2(\alpha y)} + \frac{\sinh^2(\alpha y)}{\cosh^4(\alpha y)} V^2 \right\} \\ &= 2H \left\{ \alpha + \frac{1}{3} \frac{V^2}{\alpha} \right\} \end{aligned} \quad (10.11)$$

- Kinetische energie:

$$\begin{aligned} E_{kin}^{sPSL} - E_{kin}^0 &= 2HV^2 \int_0^{+\infty} dy \left\{ -\frac{\tanh^2(\alpha y)}{\cosh^2(\alpha y)} - \frac{1}{\cosh^2(\alpha y)} \right\} \\ &= -\frac{8}{3} \frac{HV^2}{\alpha} \end{aligned} \quad (10.12)$$

met  $E_{kin}^0 = 2HYV^2$ .

- Interactie energie:

$$\begin{aligned} E_{int}^{sPSL} - E_{int}^0 &= 2H \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{(\beta - 1)}{2} \frac{1}{\cosh^4(\alpha y)} + (\gamma - 1) \frac{\tanh^2(\alpha y)}{\cosh^2(\alpha y)} \right\} \\ &= \frac{2H}{\alpha} \left( \frac{\beta + \gamma - 2}{3} \right) \end{aligned} \quad (10.13)$$

met  $E_{int}^0 = -HY(2V^2 + 1)$ . Hierbij hebben we gebruik gemaakt van de aangepaste waarde van de chemische potentiaal uit (9.10).

Als we al deze termen (10.11), (10.12) en (10.13) samennemen, bekomen we

$$\begin{aligned} E_{tot}^{sPSL} &= E_{GP}^{sPSL} - E_0 = E_{qp}^{sPSL} + (E_{kin}^{sPSL} - E_{kin}^0) + (E_{int}^{sPSL} - E_{int}^0) \\ &= 2H \left[ \alpha + \frac{1}{\alpha} \left( \frac{\beta + \gamma - 2}{3} - V^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (10.14)$$

Hieruit kunnen we de waarde van  $\alpha$  bepalen waarvoor  $E_{tot}^{sPSL}$  minimaal is. In het minimum geldt

$$0 = \frac{\partial E_{tot}^{sPSL}}{\partial \alpha} = 2H \left[ 1 - \frac{1}{\alpha^2} \left( \frac{\beta + \gamma - 2}{3} - V^2 \right) \right] \quad (10.15)$$

$$\Leftrightarrow \alpha_{sPSL} = \sqrt{\left( \frac{\beta + \gamma - 2}{3} - V^2 \right)} \quad (10.16)$$

Deze waarde kunnen we terug invullen in de totale energie. Dit levert

$$\frac{E_{tot}^{sPSL}}{2H} = 2\sqrt{\left( \frac{\beta + \gamma - 2}{3} - V^2 \right)} \quad (10.17)$$

Een opvallend feit is dat de breedte van de skyrmion-fasesliplijn afhangt van de snelheid  $V$ , terwijl dat niet het geval was bij de gewone fasesliplijn. Hoe komt dit? De beschrijving van de gewone fasesliplijn is equivalent aan de beschrijving van een condensaat aan een bewegende wand. De breedte van de gewone fasesliplijn mag niet afhangen van  $V$ , aangezien we voor elke waarde van  $V$  een Galilei transformatie kunnen bedenken waarin één helft van de fasesliplijn stilstaat. De breedte van de fasesliplijn wordt dus gegeven door de afstand die het condensaat nodig heeft om zijn dichtheid te herstellen aan een stilstaande wand. Bij de skyrmion-fasesliplijn is er sprake van twee componenten. Door de symmetrie van het systeem kunnen we opnieuw slechts één helft van de fasesliplijn bekijken. In dit geval is het echter niet mogelijk om een Galilei transformatie te bedenken die de snelheid van al het condensaat aan één helft van de fasesliplijn naar nul brengt. Er zijn twee componenten aanwezig, met elk een verschillende snelheid. De snelheid  $V$  is nu een parameter van het systeem. Het is het snelheidsverschil tussen beide componenten. Dat bepaalt de breedte van de skyrmion-fasesliplijn, via de energiebalans tussen de kinetische energie van de eerste component en de interactie energie van de tweede component. Hoe groter de interactie constanten  $\beta$  en  $\gamma$ , hoe meer energie het kost om component 2 te vormen en hoe smaller de skyrmion-fasesliplijn. Hoe groter het snelheidsverschil  $V$ , hoe groter de kinetische energie van de eerste component en hoe voordeliger om de kinetische energie van de eerste component te gebruiken om component 1 om te zetten naar stilstaande component 2. Er geldt dus: hoe groter  $V$ , hoe breder de skyrmion-fasesliplijn.

Als  $V$  te groot wordt, is het voor elke waarde van  $\alpha$  steeds voordeliger om de kinetische energie van de eerste component te gebruiken om component 1 om te zetten naar stilstaande component 2 en de fasesliplijn breder te maken ( $\alpha \rightarrow 0$ ). Deze situatie is instabiel. De uiteindelijke oplossing die we vinden is een homogeen condensaat van de tweede component. In dat geval is de skyrmion-fasesliplijn geen geldige oplossing of beschrijving van ons systeem. Deze situatie doet zich voor wanneer de uitdrukking onder de wortel van (10.16) negatief wordt. We kunnen nu een maximale snelheid definiëren, die afhangt van de interactieconstanten.

$$V_{\max} = \sqrt{\frac{\beta + \gamma - 2}{3}} \quad (10.18)$$

Bij deze maximale snelheid vinden we nog wel een reële oplossing voor  $\alpha_{sPSL}$ , maar is deze gelijk aan nul. Voor  $V < V_{\max}$  is de skyrmion-fasesliplijn een geldige oplossing van het systeem. Voor  $V \geq V_{\max}$  is de skyrmion-fasesliplijn geen geldige oplossing van het systeem. Als de interactieconstanten te laag zijn, is de uitdrukking onder de wortel kleiner dan of gelijk aan nul en bestaan er geen waarden van  $V$  waarvoor de skyrmion-fasesliplijn een geldige oplossing is. Dit is het geval voor

$$\frac{\beta + \gamma - 2}{3} \leq 0 \Leftrightarrow \gamma \leq 2 - \beta \quad (10.19)$$

We kunnen nu de optimale waarde  $\alpha_{sPSL}$  van de variationele parameter en de energie ook herschrijven in functie van  $V_{\max}$ :

$$\alpha_{sPSL} = \sqrt{V_{\max}^2 - V^2} \quad (10.20)$$

$$\frac{E_{tot}^{sPSL}}{2H} = 2\sqrt{V_{\max}^2 - V^2} \quad (10.21)$$

De energie van de fasesliplijn daalt dus bij toenemende snelheid, tot de energie nul wordt bij de maximale snelheid  $V_{\max}$ .

## 10.3 Rij skyrmionen

### 10.3.1 Beschrijving

Om de energie van een oneindige rij skyrmionen te berekenen, gebruiken we dezelfde methode als bij de skyrmion-fasesliplijn. Voor de eerste component vertrekken we van de uitdrukkingen (9.16), (9.17) en (9.18) voor de snelheid en dichtheid van een oneindige rij vortices.

$$v_{1,x} = v_{vrij,x} = \frac{V \sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \quad (10.22)$$

$$v_{1,y} = v_{vrij,y} = \frac{V \sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \quad (10.23)$$

$$f_1 = f_{vrij} = \tanh\left(\alpha \sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right) \quad (10.24)$$

De tweede component heeft snelheid nul ( $\mathbf{v}_2 = 0$ ) en zijn dichtheid is complementair aan de dichtheid van de eerste component ( $f_1^2 + f_2^2 = 1$ ), zodat de totale dichtheid 1 is.

$$f_2 = \sqrt{1 - \tanh^2\left(\alpha \sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right)} \quad (10.25)$$

Verder nemen we aan dat het condensaat homogeen is in z-richting. De eerste stap is de overgang naar de pseudospin notatie. We bepalen opnieuw de gradiënten van de totale fase  $\theta_T$  en de relatieve fase  $\phi$  uit de uitdrukkingen voor de snelheden van de componenten via  $\mathbf{v}_{s,i} = \nabla\theta_i$ .

$$\nabla\theta_2 = 0 \quad (10.26)$$

$$\nabla\theta_1 = \frac{V \sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_x - \frac{V \sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_y \quad (10.27)$$

Dit levert uiteindelijk

$$\nabla\theta_T = \frac{V}{2} \frac{\sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_x - \frac{V}{2} \frac{\sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_y \quad (10.28)$$

$$\nabla\phi = -\frac{V \sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_x + \frac{V \sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \mathbf{e}_y \quad (10.29)$$

Vervolgens kunnen we de sinus en de cosinus van de mixing angle bepalen uit de uitdrukkingen voor  $f_1$  en  $f_2$ .

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tanh\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right) \\ \frac{1}{\cosh\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right)} \end{pmatrix} \quad (10.30)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \cos(\alpha_{mix}) = \cos^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2 \tanh^2\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right) - 1 \\ \sin(\alpha_{mix}) = 2 \cos\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha_{mix}}{2}\right) = 2 \frac{\tanh\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right)}{\cosh\left(\alpha\sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2}\right)} \end{cases} \quad (10.31)$$

De totale dichtheid wordt gegeven door  $f = 1$ . We hebben nu alle gegevens die we nodig hebben om de energie te berekenen. De volgende stap is het uitwerken van de verschillende termen in (10.10), met  $H = \frac{\pi}{V}$  (analoog aan de oneindige rij vortices). De bijdrage  $\mathcal{E}_{qp}^{srj} = (\nabla f)^2$  van de kwantumdruk is nul, aangezien de totale dichtheid constant is. In de volgende sectie bepalen we een voor een de andere termen. Hierbij zonderen we divergenties voor  $Y \rightarrow +\infty$  af en nemen we de limiet  $Y \rightarrow +\infty$  voor de resterende, convergerende termen. We maken dus de aanname dat het condensaat groot is. We zullen enkel de resultaten van de berekeningen weergeven, aangezien de berekening volledig analoog is aan de berekening van de energie van een skyrmion uit hoofdstuk 4. In het eindresultaat hebben we telkens de substitutie  $\tilde{x} = Vx$  en  $\tilde{y} = Vy$  uitgevoerd en de tildes weggelaten, aangezien na deze substitutie de resterende integralen enkel nog afhangen van  $\frac{\alpha}{V}$ .

### 10.3.2 Energieberekening

#### Pseudospin bijdrage

De energiebijdrage te wijten aan gradiënten in de pseudospin wordt gegeven door

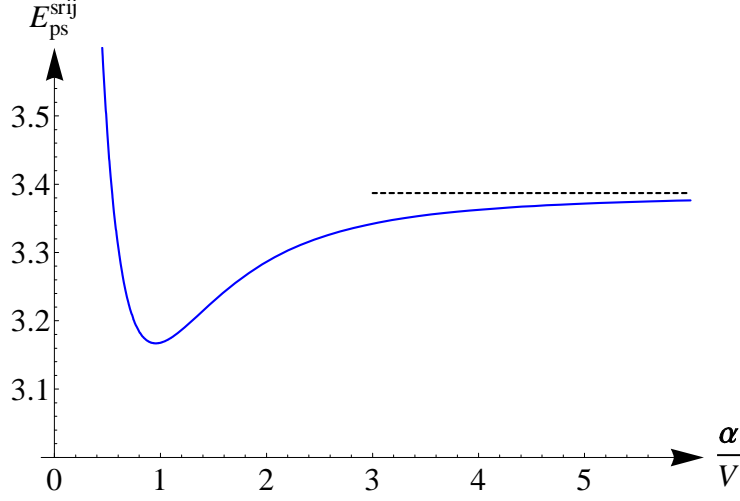
$$\begin{aligned} E_{ps}^{srj}\left(\frac{\alpha}{V}\right) &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\left(\frac{\alpha}{V}\right)^2}{\cosh^2\left(\frac{\alpha}{V}\sqrt{\sin^2 x + y^2}\right)} \frac{(\sin^2 x \cos^2 x + y^2)}{(\sin^2 x + y^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tanh^2\left(\frac{\alpha}{V}\sqrt{\sin^2 x + y^2}\right) \sinh^2(2y) + \sin^2(2x)}{\cosh^2\left(\frac{\alpha}{V}\sqrt{\sin^2 x + y^2}\right) [\cosh(2y) - \cos(2x)]^2} \right\} \end{aligned} \quad (10.32)$$

Deze uitdrukking is niet analytisch oplosbaar, maar wel numeriek integreerbaar in Mathematica. Het resultaat wordt weergegeven in figuur 10.1 als functie van  $\frac{\alpha}{V}$ .

$\frac{\alpha}{V}$  is een maat voor de verhouding tussen de afstand  $\frac{\pi}{V}$  tussen de skyrmionen en de grootte  $\frac{1}{\alpha}$  van het skyrmion. Het is dus ook een uitdrukking voor de mate waarin de skyrmionen elkaar zullen beïnvloeden. Voor  $\frac{\alpha}{V} \rightarrow +\infty$  is de afstand tussen de skyrmionen groot of zijn de skyrmionen zo klein dat ze elkaar amper beïnvloeden. In deze limiet wordt de pseudospin bijdrage gelijk aan de halve pseudospin bijdrage van één enkel skyrmion (we integreren in y-richting slechts over de halve ruimte).

$$E_{ps}^{srj}\left(\frac{\alpha}{V} \rightarrow +\infty\right) = \frac{E_{ps}^{skym}}{2} = 3.38687 \quad (10.33)$$

Voor kleinere waarden van  $\frac{\alpha}{V}$  zullen de skyrmionen elkaar steeds sterker beïnvloeden. Als  $\frac{\alpha}{V}$  nog niet te klein is, is dit energetisch voordelig: de pseudospin moet zich minder herstellen tussen twee skyrmionen in, waardoor er minder pseudospin gradiënten zijn. Hierdoor daalt de energie als  $\frac{\alpha}{V}$  afneemt tot aan het minimum in  $\frac{\alpha}{V} = 0.96$  bij  $E_{ps}^{srj} = 3.16707\dots$ . In de energiebijdrage van de pseudospin gradiënt zit echter ook een stuk kinetische energie vervat, via gradiënten van de relatieve fase. Deze bijdrage wordt groot voor  $\frac{\alpha}{V} \rightarrow 0$ . Als de skyrmionen oneindig dicht bij elkaar komen, wordt het opgetelde snelheidsveld van al deze skyrmionen en de gerelateerde pseudospin gradiënt oneindig groot. Hierdoor gaat  $E_{ps}^{srj} \rightarrow +\infty$  voor  $\frac{\alpha}{V} \rightarrow 0$ .



Figuur 10.1: De energiebijdrage per skyrmion te wijten aan gradiënten in de pseudospin van een oneindige rij skyrmionen als functie van  $\frac{\alpha}{V}$ . Voor  $\frac{\alpha}{V} \rightarrow +\infty$  benadert  $E_{ps}^{srij}$  de bijdrage van één enkele vortex in een condensaat (zwarte stippellijn).

### Kinetische energie

Om kinetische energie te berekenen, moeten we eerst  $\mathbf{v}_{s,eff}$  berekenen. Hierbij maken we gebruik van uitdrukkingen (10.28) en (10.29) voor de totale en voor de relatieve fase.

$$\mathbf{v}_{s,eff} = \nabla\theta_T - \frac{1}{2} \cos[\alpha_{mix}] \nabla\phi \quad (10.34)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} (\mathbf{v}_{s,eff})_x = V \tanh^2 \left( \alpha \sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2} \right) \frac{\sinh(2Vy)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \\ (\mathbf{v}_{s,eff})_y = -V \tanh^2 \left( \alpha \sqrt{\frac{\sin^2(Vx)}{V^2} + y^2} \right) \frac{V \sin(2Vx)}{\cosh(2Vy) - \cos(2Vx)} \end{cases} \quad (10.35)$$

Hieruit kunnen we de kinetische energie berekenen, met  $E_{kin}^0 = \pi YV$ .

$$E_{kin}^{srij} - E_{kin}^0 = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \tanh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right) \frac{\sinh^2(2y) + \sin^2(2x)}{[\cosh(2y) - \cos(2x)]^2} - 1 \right\} \quad (10.36)$$

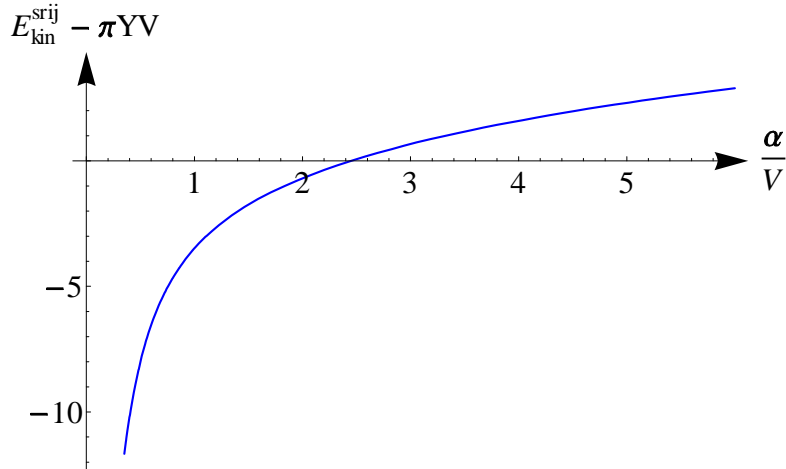
Hierbij hebben we de substitutie  $\tilde{x} = Vx$  en  $\tilde{y} = Vy$  reeds uitgevoerd en de tildes weggelaten. De resterende uitdrukking is niet analytisch oplosbaar, maar wel numeriek integreerbaar in Mathematica. Het resultaat wordt weergegeven in figuur 10.2. We zien duidelijk dat de kinetische energie per skyrmion een monotoon stijgende functie is van  $\frac{\alpha}{V}$ . Als  $\alpha$  toeneemt en de grootte  $\frac{1}{\alpha}$  van de skyrmionen afneemt, is er meer bewegende component 1 aanwezig en stijgt de kinetische energie. Als de snelheid  $V$  toeneemt, neemt de kinetische energie per skyrmion af. Dit lijkt op het eerste zicht vreemd, maar wordt veroorzaakt door het feit dat er bij grotere snelheden meer skyrmionen aanwezig zijn, waardoor de skyrmionen meer overlappen. Daardoor is er in verhouding meer niet-bewegende component 2 aanwezig en daalt de energie. Verder neemt ook het oppervlak van het condensaat waarover we integreren af, wat een extra verlaging van de kinetische energie per skyrmion veroorzaakt.

### Interactie energie

De volgende term is de interactie energie. Deze is bepaald door  $\mathcal{E}_{int}^{srij}$  en  $\mathcal{E}_{magn}^{srij}$ , waarbij we in  $\mathcal{E}_{int}^{srij}$  de waarde voor de chemische potentiaal uit (9.10) gebruiken.

$$\mathcal{E}_{int}^{srij} = -\mu f^2 + \frac{1}{2} f^4 = -\left( \frac{1}{2} + V^2 \right) \quad (10.37)$$





Figuur 10.2: De kinetische energie per skyrmion van een oneindige rij skyrmionen als functie van  $\frac{\alpha}{V}$ .

Na enig rekenwerk bekomen we

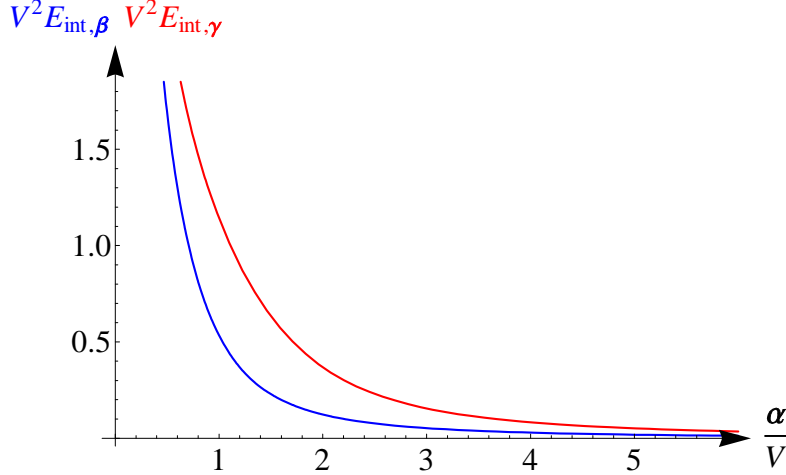
$$\begin{aligned} (E_{int}^{srij} - E_{int}^0) = & \frac{1}{V^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{(\beta - 1)}{2} \frac{1}{\cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right. \\ & \left. + (\gamma - 1) \frac{\tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)}{\cosh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right\} \end{aligned} \quad (10.38)$$

met  $E_{int}^0 = -\frac{\pi Y}{V} \left( \frac{1}{2} + V^2 \right)$ . Deze uitdrukking is niet analytisch oplosbaar, maar wel numeriek uit te werken in Mathematica. Om duidelijk het effect van de verschillende interactieconstanten te zien, hebben we de interactie energie gesplitst in twee bijdragen.

$$E_{int,\beta}^{srij} = \frac{(\beta - 1)}{2V^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{1}{\cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right\} \quad (10.39)$$

$$E_{int,\gamma}^{srij} = \frac{(\gamma - 1)}{V^2} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)}{\cosh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right\} \quad (10.40)$$

Het resultaat voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 2$  wordt weergegeven in figuur 10.3. Of de interactie energie toeneemt of afneemt als functie van  $\alpha a$ , hangt af van van de interactieconstanten. Als  $\beta$  groot genoeg is en algemeen als  $\gamma > 1$ , zal de interactie energie toenemen als  $\frac{\alpha}{V}$  afneemt. Als de snelheid  $V$  stijgt en er meer skyrmionen per lengte-eenheid aanwezig zijn, of als  $\alpha$  daalt en de skyrmionen groter worden, zullen de skyrmionen meer met elkaar overlappen en neemt de hoeveelheid component 2 per skyrmion toe. Hierdoor stijgt de interactie energie. Als  $\gamma < 1$  is het mogelijk dat de interactie energie daalt als functie van  $\frac{\alpha}{V}$ . In dat geval doet de zwakke interactie tussen beide componenten de interactie energie dalen bij het vergroten van de hoeveelheid component 2.



Figuur 10.3: De interactie energie per skyrmion van een oneindige rij skyrmionen als functie van  $V$  voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 2$ , gesplitst in de aparte bijdragen van de termen evenredig met  $(\beta - 1)$  en  $(\gamma - 1)$ .

### Totale energie

We kunnen nu de verschillende termen (10.32), (10.36) en (10.38) samenvoegen.

$$\begin{aligned}
E_{tot}^{srij} \left( V, \frac{\alpha}{V}, \beta, \gamma \right) &= E_{GP}^{srij} - E_0 = E_{qp}^{srij} + \left( E_{kin}^{srij} - E_{kin}^0 \right) + \left( E_{int}^{srij} - E_{int}^0 \right) \\
&= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ \frac{\left( \frac{\alpha}{V} \right)^2 (\sin^2 x \cos^2 x + y^2)}{\cosh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right) (\sin^2 x + y^2)} \right. \\
&\quad + \tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right) \frac{\sinh^2(2y) + \sin^2(2x)}{[\cosh(2y) - \cos(2x)]^2} - 1 \\
&\quad \left. + \frac{1}{V^2} \frac{(\beta - 1)}{2} \frac{1}{2 \cosh^4 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} + \frac{1}{V^2} (\gamma - 1) \frac{\tanh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)}{\cosh^2 \left( \frac{\alpha}{V} \sqrt{\sin^2 x + y^2} \right)} \right\} \quad (10.41)
\end{aligned}$$

Bovenstaande uitdrukkingen zijn niet meer analytisch op te lossen naar  $\alpha$ . Deze uitwerking was niet triviaal, aangezien verschillende termen in het integrandum divergeren of sterk variëren in de buurt van de oorsprong.

### 10.3.3 Bespreking

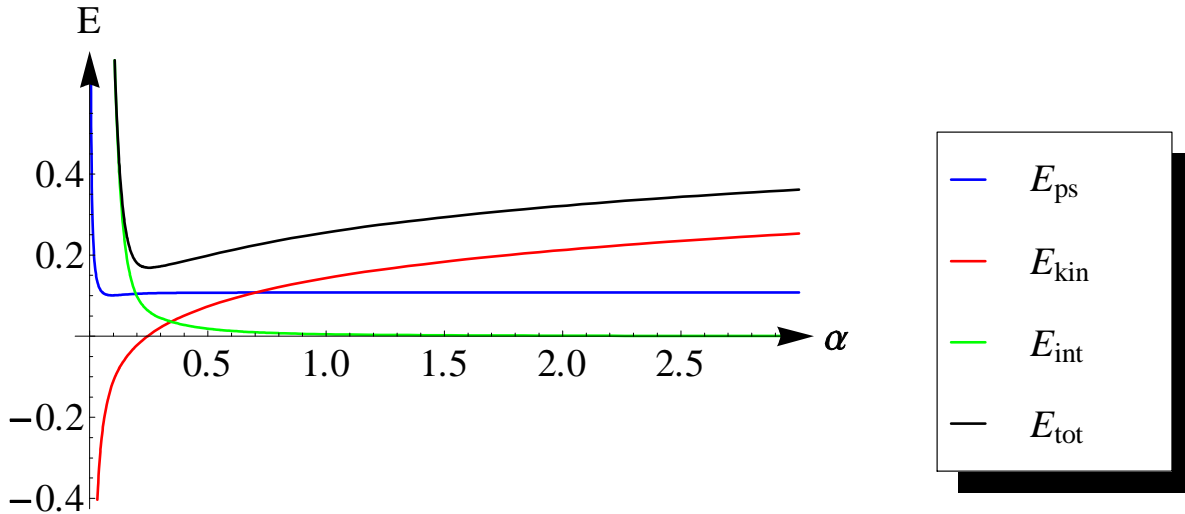
De energie van de oneindige rij skyrmionen hangt af van 4 parameters:  $\alpha$ ,  $V$ ,  $\beta$  en  $\gamma$  of  $\alpha$ ,  $\frac{\alpha}{V}$ ,  $\beta$  en  $\gamma$ . In een figuur kunnen we de energie niet als functie van 4 variabelen weergeven. Om te zien wat er juist gebeurt, bekijken we dus eerst wat er gebeurt voor één welbepaalde waarde van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ . Vervolgens zullen we het gedrag van de energie bij deze waarde gebruiken als startpunt voor algemenere conclusies.

Als voorbeeld kiezen we  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ . Voor verschillende snelheden zijn er 3 gevallen te onderscheiden, naargelang het gedrag van de totale energie in de limiet  $\alpha \rightarrow 0$ :

- $E_{tot}^{srij} \rightarrow +\infty$  voor  $\alpha \rightarrow 0$ : Er bestaat een realistische waarde van  $\alpha$  waarvoor  $E_{tot}^{srij}$  minimaal is.
- $E_{tot}^{srij} \rightarrow 0$  voor  $\alpha \rightarrow 0$ : De totale energie is minimaal voor  $\alpha = 0$ . Dit komt overeen met het geval van een homogeen tweecomponentscondensaat. De oneindige rij skyrmionen is dus geen goede beschrijving van het systeem.

- $E_{tot}^{srij} \rightarrow -\infty$  voor  $\alpha \rightarrow 0$ : De energie is minimaal voor  $\alpha = 0$  en de oneindige rij skyrmionen is geen goede beschrijving van het systeem.

De verschillende gevallen worden weergegeven in figuur 10.4, 10.5 en 10.6.



Figuur 10.4: De verschillende bijdragen tot de energie van een rij skyrmionen voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  bij  $V = 0.1$  in functie van de variationale parameter  $\alpha$ . De gekozen snelheid is kleiner dan de kritische snelheid, zodat  $E_{tot}^{srij} \rightarrow +\infty$  voor  $\alpha \rightarrow 0$ . Er is een duidelijk stabiel minimum van  $E_{tot}^{srij}$  bij  $\alpha \approx 0.25$ .

Het onderscheid tussen deze gevallen komt van de energiebalans tussen de verschillende termen. De grootte van de skyrmionen wordt voornamelijk bepaald door de balans tussen de kinetische energie en de interactie energie. Hoe groter de snelheid van het condensaat, hoe groter de kinetische energie van de eerste component en hoe groter de energiewinst die we maken als we het skyrmion groter maken. Vanaf een bepaalde maximale snelheid  $V_{\max}$  (dus voor  $V > V_{\max}$ ) is de kinetische energie van de eerste component zo groot, dat het altijd energetisch voordeliger is om de bewegende eerste component om te zetten naar niet-bewegende tweede component. In dat geval is de rij skyrmionen geen geldige oplossing van het systeem.

Wat is de waarde van deze maximale snelheid? Het oneindig groot worden van het skyrmion voor  $V \rightarrow V_{\max}$  komt overeen met de limiet  $\alpha \rightarrow 0$ . In deze limiet wordt de golf functie van de rij skyrmionen bij benadering gelijk aan de golf functie van de skyrmion-fasesliplijn en wordt de energie van beide systemen gelijk. Ze zullen dan ook dezelfde maximale snelheid hebben. Voor de skyrmion-fasesliplijn wordt de maximale snelheid gegeven door (10.18). Deze uitdrukking kunnen we nu ook gebruiken voor de rij skyrmionen.

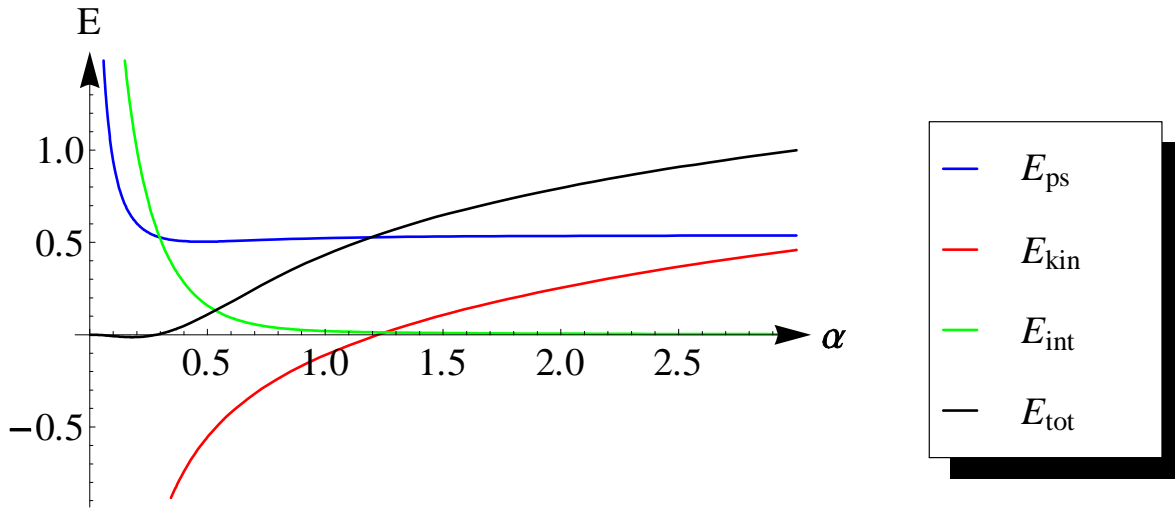
$$V_{\max} = \sqrt{\frac{\beta + \gamma - 2}{3}} \quad (10.42)$$

De drie gevallen die we eerder hebben onderscheiden voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  komen dus overeen met  $V < V_{\max}$ ,  $V = V_{\max}$  en  $V > V_{\max}$ .

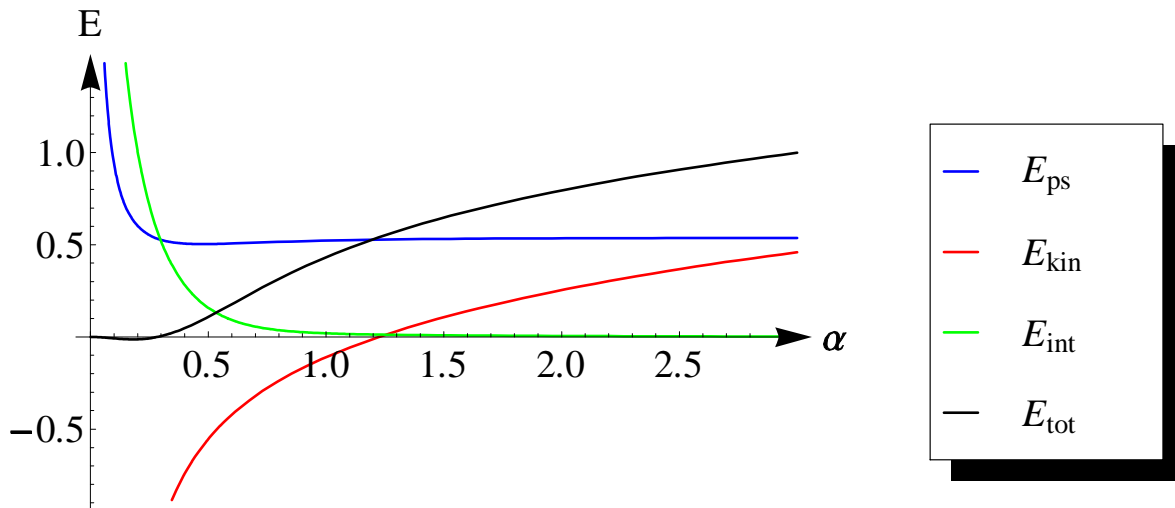
Merk op dat de limiet voor  $\alpha \rightarrow 0$  van de energie niet hetzelfde is als de energie van de limiet voor  $\alpha \rightarrow 0$  van het integrandum. De laatste limiet wordt gegeven door

$$E_{tot}^{srij} \Big|_{\alpha=0} = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{+\infty} dy \left\{ -1 + \frac{(\beta - 1)}{2V^2} \right\} \quad (10.43)$$

en is enkel nul voor  $V = \sqrt{\frac{\beta - 1}{2}}$ . In de numerieke uitwerking voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  was echter duidelijk dat  $\lim_{\alpha \rightarrow 0} [E_{tot}^{srij}] \rightarrow -\infty$  bij  $V = \sqrt{\frac{\beta - 1}{2}} = 0.707 \dots$  (zie figuur 10.6). Dit verschil wordt veroorzaakt door



Figuur 10.5: De verschillende bijdragen tot de energie van een rij skyrmionen voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  bij  $V = 0.5$  in functie van de variationele parameter  $\alpha$ . De gekozen snelheid is de kritische snelheid van het systeem, waardoor de energie eindig blijft voor  $\alpha \rightarrow 0$ .



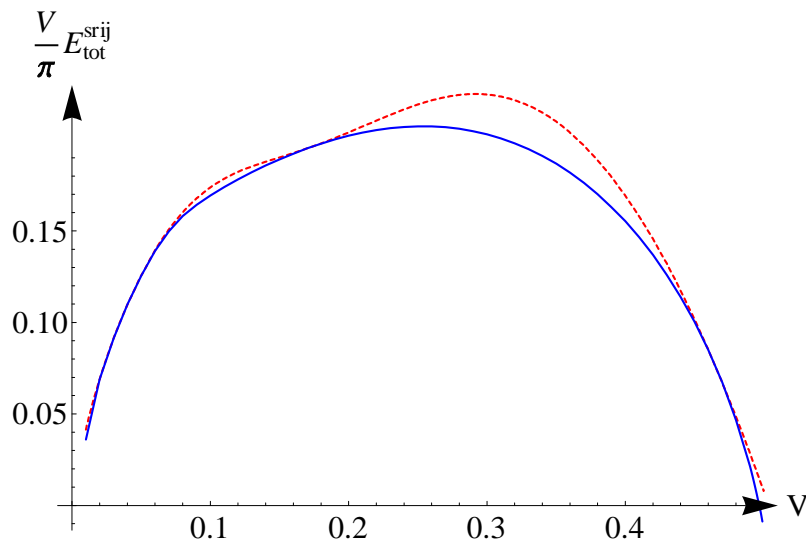
Figuur 10.6: De verschillende bijdragen tot de energie van een rij skyrmionen voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  bij  $V = \sqrt{0.5} = 0.707\dots$  in functie van de variationele parameter  $\alpha$ . De gekozen snelheid is groter dan de kritische snelheid, zodat  $E_{tot}^{srij} \rightarrow -\infty$  voor  $\alpha \rightarrow 0$ . De rij skyrmionen is in dit geval dus niet stabiel.

het feit dat het integrandum puntsgewijs convergeert naar zijn limiet voor  $\alpha \rightarrow 0$ , maar niet uniform. Het nemen van de limiet mag enkel verwisseld worden met integratie als de limiet uniform convergeert, wat hier duidelijk niet het geval is.

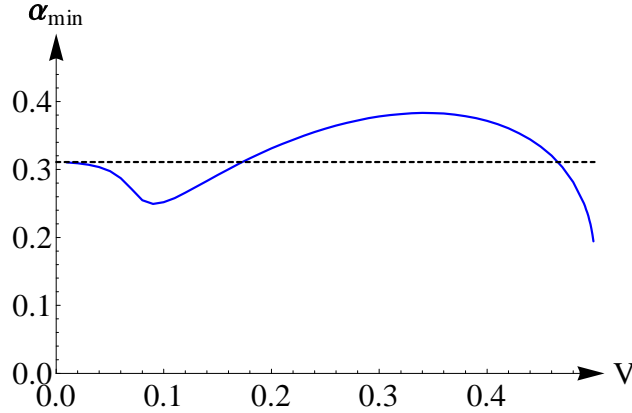
We kunnen nu bestuderen wat het gedrag is van de energie en van de optimale waarde van de variationele parameter  $\alpha$  voor  $V < V_{\max}$ . Hiervoor beginnen we opnieuw bij  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ . Voor deze waarden van de interactieconstanten wordt de totale energie  $\frac{V}{\pi} E_{\text{tot}}^{\text{srij}}$  per lengte-eenheid weergegeven in figuur 10.7 en de optimale waarde van  $\alpha$  in figuur 10.8. De totale energie die wordt weergegeven is het verschil tussen de energie van de oneindige rij skyrmionen en de energie van een homogeen condensaat met uniforme dichtheid en snelheid  $V$ . Bij  $V = 0$  is de energie nul. Als de energie toeneemt, worden er steeds meer skyrmionen gevormd. Meer skyrmionen betekent meer vervorming van de pseudospin, meer kinetische energie en meer interactie energie. Hierdoor neemt de totale energie per lengte-eenheid toe, zoals ook het geval was voor de oneindige rij vortices in figuur 9.5. Als de snelheid nog verder toeneemt, begint het energetisch voordelig te worden om het skyrmion steeds groter te maken (en kleiner). Hierdoor daalt de energie per lengte-eenheid, tot deze naar nul gaat voor  $V \rightarrow V_{\max}$ .

Het verloop van  $\alpha$  is iets merkwaardiger. Voor toenemende snelheden  $V$  neemt  $\alpha$  eerst af (en de grootte van het skyrmion toe), tot een minimum (resp. maximum) rond  $V = 0.09$ . Vervolgens neemt  $\alpha$  toe (en de grootte van het skyrmion af), tot een maximum (resp. minimum) rond  $V = 0.34$ . Daarna neemt  $\alpha$  opnieuw af, tot  $\alpha$  naar nul gaat voor  $V \rightarrow V_{\max} = 0.5$ . Enkel deze laatste daling is op het eerste zicht te verklaren: deze is te wijten aan het feit dat het bij toenemende snelheid  $V$  energetisch steeds voordeliger wordt om de bewegende component 1 om te zetten naar stilstaande component 2. Om de andere variaties te verklaren moeten we kijken naar de evolutie van  $\alpha_{\min}$  in het geval van twee skyrmionen op afstand  $a$  van elkaar. Wanneer de skyrmionen elkaar beginnen te overlappen, kan de interactie energie sterk variëren op korte afstanden, wat zich weerspiegelt in de evolutie van de grootte van de skyrmionen in figuur 8.10. De afstand tussen de skyrmionen wordt voor de oneindige rij skyrmionen gegeven door  $a = \frac{\pi}{V}$ . De evoluties die we zien in figuur 10.8 als functie van  $V$  kunnen we dus in het licht zien van de evoluties in figuur 8.10 als functie van  $\frac{\pi}{V}$ . Het is geen exacte correspondentie, aangezien het aantal skyrmionen het verband beïnvloedt. Wel zien we dat de waarden in de minima en in de maxima in beide figuren overeenkomt.

Behalve voor heel kleine snelheden ( $V \ll V_{\max}$ ) is het duidelijk geen goede benadering om met constante skyrmiongrootte te werken. De interactie tussen de skyrmionen verandert de grootte van de skyrmionen en dus ook de energie. Bij de oneindige rij skyrmionen is het dus belangrijk om met variabele skyrmiongrootte te werken.



Figuur 10.7: Energie per lengte-eenheid van de oneindige rij skyrmionen bij  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  als functie van de snelheid  $V$  bij aangepaste skyrmiongrootte (blauwe curve) en bij vaste skyrmiongrootte ( $\alpha = \alpha_{\text{skyr}} = 0.31$ , zwart gestreepte curve). Het is duidelijk belangrijk om met aangepaste skyrmiongrootte te werken.



Figuur 10.8: De evolutie van de optimale waarde  $\alpha_{\min}$  van de variationele parameter van de oneindige rij skyrmionen voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  als functie van de snelheid  $V$  op oneindig grote afstand van de skyrmionrij. De curve loopt niet volledig door tot  $V = V_{\max}$ , aangezien de verschillende divergenties voor  $V \rightarrow V_{\max}$  in de energie voor numerieke problemen zorgden.

## 10.4 Vergelijking tussen een rij skyrmionen en een skyrmion fasesliplijn

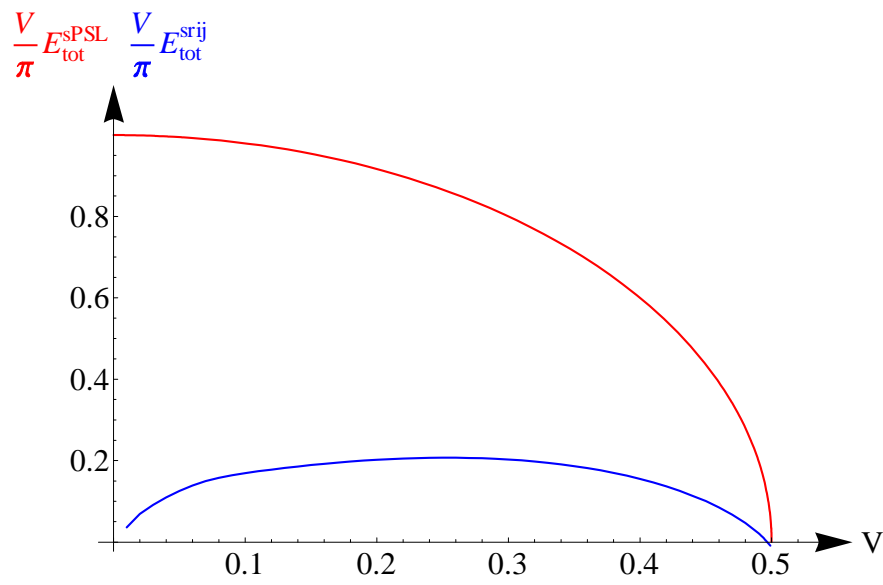
De energie  $E_{tot}^{sPSL}$  van een skyrmion-fasesliplijn is gegeven door (10.17). De energie  $E_{tot}^{srij}$  van een rij skyrmionen is gegeven door (10.41). Om beide energieën te vergelijken, hebben we deze eerst geplot voor  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$  in figuur 10.9. Bij de kritische snelheid  $V_{\max}$  is de energie van de skyrmionrij gelijk aan de energie van de skyrmion-fasesliplijn, maar zijn beide instabiel (de optimale waarde van  $\alpha$  is nul). Voor lagere snelheden is het energieminimum van de skyrmionrij lager dan de energie van de skyrmion-fasesliplijn. Een rij skyrmionen is dus altijd energetisch voordeliger dan een skyrmion-fasesliplijn.

Voor de bijdrage van de pseudospin radiënten is het energetisch voordeliger om een rij skyrmionen te vormen. Dit komt omdat het energetisch voordeliger is om de pseudospin te verbuigen rond verschillende discrete punten (de skyrmionen), dan om de pseudospin te verbuigen langs de volledige lijn van de skyrmion-fasesliplijn.

Voor de kinetische energie is de skyrmion-fasesliplijn energetisch voordeliger. Tussen de skyrmionen in is er nog bewegend condensaat aanwezig, waardoor er bij een rij skyrmionen meer bewegend condensaat aanwezig is dan bij de skyrmion-fasesliplijn.

De invloed van de interactie energie hangt sterk af van de waarden van de interactie energie, maar algemeen vinden we terug dat de interactie energie van een rij skyrmionen kleiner is dan de interactie energie van de skyrmion-fasesliplijn. Als dit niet het geval zou zijn, is het energetisch voordeliger om steeds meer condensaat van component 2 aan te maken en zijn zowel de rij skyrmionen als de skyrmion-fasesliplijn instabiel.

We verwachten dat de stabiliteitsvoorwaarde ervoor zorgt dat de rij skyrmionen altijd energetisch voordeliger is dan de skyrmion-fasesliplijn. In het gebied waar de skyrmion-fasesliplijn energetisch voordeliger kan zijn, zijn ze beide instabiel. Deze trend vonden we terug voor alle geteste waarden van  $\beta$  en  $\gamma$ . Door de lange rekentijd die nodig is om de energie te minimaliseren, konden we niet uitsluiten dat er waarden bestaan waarvoor de skyrmion-fasesliplijn energetisch voordeliger is dan de rij skyrmionen. We hebben echter geen aanleiding gevonden om aan te nemen dat dit ergens het geval is.



Figuur 10.9: De energie per lengte-eenheid van een oneindige rij skyrmionen en een skyrmion fasesliplijn bij  $\beta = 2$  en  $\gamma = 0.75$ . We zien duidelijk dat de rij skyrmionen energetisch voordeliger is dan de skyrmion-fasesliplijn, hoewel het energieverschil verkleint voor toenemende snelheden.





**Deel V**  
**Conclusie**



# Hoofdstuk 11

## Conclusie

We hebben de eigenschappen van twee verschillende topologische excitaties in een groot tweecomponentscondensaat bestudeerd: een vortex en een skyrmion. Dit deden we aan de hand van de keuze van een variationele golf functie met als parameter de grootte  $\frac{1}{\alpha}$  van de excitatie, waarvan we de energie minimaliseerden. In alle berekeningen namen we aan dat beide componenten van het tweecomponentscondensaat in elkaar omgezet kunnen worden. De component met de zwakste interactie noemen we component 1, de component met de sterkste interactie component 2. In het eerste deel van dit eindwerk bekeken we de achtergrond en de beschrijving van het systeem.

In het tweede deel hebben we één vortex in een ééncomponentscondensaat en één skyrmion in een tweecomponentscondensaat bestudeerd, zowel bij constante chemische potentiaal als bij constant aantal deeltjes. Hierbij hebben we rekening gehouden met de grootte van de vortex of het skyrmion. De grootte van een vortex hangt af van het regime. Bij constante chemische potentiaal neemt de grootte van de vortex af als de rotatiefrequentie  $\Omega$  toeneemt. Bij constant aantal deeltjes is de grootte van de vortex constant. De grootte van een skyrmion is sterk afhankelijk van de rotatiefrequentie  $\Omega$  en de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ . Als  $\Omega$ ,  $\beta$  of  $\gamma$  toenemen, neemt de skyrmiongrootte af.

Een groot verschil tussen een vortex en een skyrmion is dat het skyrmion niet voor alle waarden van de rotatiefrequentie  $\Omega$  en van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  stabiel kan zijn. Als de interactieconstanten laag genoeg zijn, is het energetisch voordeliger om de kinetische energie van de roterende eerste component te gebruiken om meer condensaat van de niet-roterende tweede component te vormen. De rotatiefrequentie  $\Omega$  heeft een stabiliserend effect op het skyrmion.

Als we de energie van beide excitaties vergelijken, bekomen we de fasediagrammen uit hoofdstuk 5. Daar zagen we dat er slechts een beperkt gebied van interactieconstanten en rotatiefrequentie is waarbinnen het skyrmion energetisch voordeliger is dan een vortex. Bij constante chemische potentiaal is dit gebied groter dan bij constant aantal deeltjes. De omstandigheden waarbij skyrmionen experimenteel werden gecreëerd vallen binnen het gebied waar skyrmionen volgens onze berekeningen energetisch voordelig zijn.

Vortices kunnen enkel gecreëerd worden in een stilstaand condensaat door een vortexlijn van buiten het condensaat naar binnen te trekken. Skyrmionen kunnen op dezelfde wijze gecreëerd worden. We hebben onderzocht of er nog een andere wijze is om het skyrmion te creëren en we vonden dat dit inderdaad het geval is. We kunnen een skyrmion creëren in een stilstaand ééncomponentscondensaat door de pseudospinstructuur vanaf de rand toe zodanig te vervormen dat we de pseudospinstructuur vanaf alle kanten naar binnen brengen (in plaats van vanaf één punt aan de rand). Hierbij wordt vanaf de rand stilstaand condensaat van de ene component omgezet in roterend condensaat van de andere component. Deze methode is experimenteel realiseerbaar in gassen van ultrakoude atomen, aangezien men via het insturen van een radiofrequent magnetisch veld (of Rabi-oscillaties) de verhouding tussen de componenten kan aanpassen. Verder onderzoek moet uitwijzen of dit ook energetisch voordeliger is dan het skyrmion op dezelfde wijze als bij vortices vanaf de rand naar binnen te trekken.

Als opmerking moeten we vermelden dat onze resultaten minder betrouwbaar zijn voor  $\gamma < 1$ , aangezien de dichtheid van de meest stabiele skyrmiontoestand in dat geval naar een gemengd condensaat gaat op grote afstand van het skyrmion, in plaats van naar een ééncomponentscondensaat. Verder onderzoek moet

nog uitwijzen of dit een groot effect heeft op de energie en de grootte van het skyrmion.

In het derde deel hebben we de interacties tussen twee vortices en tussen twee skyrmionen bestudeerd. Hierbij onderzochten we of het variationeel aanpassen van de grootte van de vortices en de skyrmionen invloed had op de potentiaal. We moeten hierbij onderscheid maken tussen twee verschillende gevallen: bij afstanden groter dan de orde grootte van de vortices of skyrmionen en bij kleinere afstanden. In het eerste geval vonden we dat de invloed van het aanpassen van de grootte van de excitatie verwaarloosbaar is. Hierbij stoten vortices elkaar af volgens de logaritmische potentiaal uit de literatuur. Skyrmionen stoten elkaar af volgens een potentiaal die benaderend logaritmisch is.

Op afstanden van de orde van de coherentielengte verlaagt het variationeel aanpassen van de grootte van de excitatie duidelijk de energie. De potentiaal wordt dus minder afstotend op korte afstanden dan men via een model met vaste grootte zou terugvinden. In vloeibaar helium is de coherentielengte zeer klein en is de fout dus beperkt, maar in condensaten van ultrakoude atomen kan de coherentielengte groot zijn en is het dus belangrijk om met aangepaste grootte te werken. De grootte van de vortices neemt toe als de afstand tussen de vortices afneemt. Bij een skyrmionpaar is dit verband minder duidelijk: het hangt af van de exacte waarden van de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$ . Een belangrijk verschil tussen vortices en skyrmionen is dat een skyrmion met windingsgetal  $Q = 2$  metastabiel kan zijn voor bepaalde waarden van  $\beta$  en  $\gamma$ , terwijl een vortex met twee circulatiekwanta niet stabiel is en bij een kleine perturbatie splitst in twee vortices met twee circulatiekwanta.

Voor een vortex-antivortex paar en een skyrmion-antiskyrmion paar vonden we gelijkaardige resultaten, met als enige verschil dat zowel een vortex en een antivortex als een skyrmion en een antiskyrmion elkaar aantrekken in plaats van elkaar af te stoten. Op afstanden groter dan de coherentielengte is het een goede benadering om met vaste vortex- of skyrmiongrootte te werken. Op afstanden kleiner dan de coherentielengte zorgt de variabele vortex- of skyrmiongrootte voor een significante verlaging van de energie, waardoor de potentiaal sterker attractief wordt. Als de vortex en de antivortex dichter bij elkaar komen daalt de grootte van de vortex. Dezelfde trend vonden we voor het skyrmion-antiskyrmionpaar.

In twee-bandkloof of type 1.5 supergeleiders observeert men dat de fluxlijnen zich groeperen in slierten, in plaats van zich te ordenen in het gewoonlijk geobserveerde roosterpatroon. Hier is dus waarschijnlijk sprake van een combinatie van repulsie op korte afstanden en attractie op grotere afstanden. Het is nog niet bekend of dit te wijten is aan vortices of skyrmionen. We hebben hier geen aanleiding gevonden om te veronderstellen dat het te wijten is aan interacties tussen skyrmionen. Er zijn echter nog verschillende mogelijkheden die hier niet onderzocht zijn. Een hypothese is dat deze interactie te wijten is aan een mogelijk dipool effect wanneer vortices in de verschillende componenten of beide componenten in een skyrmion niet rond hetzelfde punt gecentreerd zijn. Dit wordt voor het geval van vortices onderzocht door Stijn Ceuppens in zijn masterthesis en zal ook het onderwerp zijn van toekomstig onderzoek. Verder hebben we aangenomen dat de variationele parameter voor beide componenten dezelfde waarde aanneemt. Ook dit hoeft niet het geval te zijn en zal het onderwerp zijn van toekomstig onderzoek.

In het vierde deel hebben we de interactie tussen meerdere vortices of meerdere skyrmionen bestudeerd, door te kijken naar de oneindige rij vortices en de oneindige rij skyrmionen op de scheidingslijn tussen stilstaand en bewegend condensaat (met snelheid  $V$ ). We stelden ons de vraag of een oneindige rij vortices (of skyrmionen) ooit over kan gaan tot een (skyrmion)fasesliplijn. Bij vortices werd dit reeds bestudeerd door Ben Van Duppen. Hij vond dat de oneindige rij vortices nooit overgaat tot een fasesliplijn, hoewel de golf functie van de oneindige rij vortices in de limiet wel puntsgewijs convergeert naar de fasesliplijn. Wij vonden dat de rij skyrmionen waarschijnlijk ook nooit over gaat tot een skyrmion-fasesliplijn. We hebben niet kunnen uitsluiten dat er waarden voor de interactieconstanten  $\beta$  en  $\gamma$  en de snelheid  $V$  bestaan waarvoor de skyrmion-fasesliplijn energetisch voordeliger is dan de rij skyrmionen, maar we hebben geen aanleiding gevonden om aan te nemen dat dit ergens het geval zou zijn.

Als algemene conclusie kunnen we stellen dat het belangrijkste verschil tussen vortices en skyrmionen, eruit bestaat dat de grootte van skyrmionen veel sterker kan variëren dan de grootte van een vortex. Bij skyrmionen is het veel belangrijker om met variabele skyrmiongrootte te werken dan bij vortices. De grootte van het skyrmion heeft invloed op zijn stabiliteit, zijn energie en op zijn interacties. De grootte van het skyrmion is sterk afhankelijk van de interactiesterkten van de verschillende componenten. Om skyrmionen

goed te beschrijven, is het dan ook belangrijk om de parameters van het systeem te kennen. Omgekeerd zou men in theorie de parameters van een systeem moeten kunnen afschatten op basis van de interacties tussen skyrmionen in het systeem, of zelfs enkel uit het feit dat er zich skyrmionen in het systeem bevinden (uit de stabiliteitsvoorwaarde voor het skyrmion), maar dit moet met enige omzichtigheid benaderd worden.



## Bijlage A

# Gross-Pitaevskii energiefunctionaal in een roterend assenstelsel

Om de optimale golf functie van een Bose-Einstein condensaat te vinden, moeten we de Gross-Pitaevskii energiefunctionaal uit (1.5) minimaliseren, met als randvoorwaarde dat het aantal deeltjes constant blijft. Deze is gegeven door

$$\begin{aligned} E_{GP}[\Psi] &= \langle \Psi | \hat{H}_0 | \Psi \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right\} \Psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

We willen vortices in een roterend condensaat bestuderen. Als we het condensaat willen roteren, moeten we de 'emmer' of invangspotentiaal  $V(\mathbf{r})$  waarin het condensaat zich bevindt met een bepaalde snelheid laten roteren. Het laboratorium-referentiestelsel is dan niet langer het best gepaste referentiestelsel, omdat de roterende wanden van de 'emmer' een tijdsafhankelijke potentiaal voorstellen die werk kan leveren op het systeem. Als we dit probleem willen vereenvoudigen, moeten we dus transformeren naar een meedraaiend assenstelsel waarin de potentiaal  $V(\mathbf{r})$  stationair is.

Als we het condensaat roteren rond de as  $\mathbf{e}_\Omega$  aan een frequentie  $\Omega$ , wordt de snelheid  $\mathbf{v}_{rot}$  in ons nieuwe meedraaiende assenstelsel gegeven door  $\mathbf{v}_{rot} = \mathbf{v} - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})$ , met  $\mathbf{v}$  de snelheid in het laboratoriumstelsel en  $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \mathbf{e}_\Omega$  de rotatievector. De potentiaaltermen zijn invariant onder rotatie: de interatomaire interacties hangen enkel af van de afstand tussen de atomen en de opsluitingspotentiaal is ook invariant, want dat was de reden dat we zijn overgegaan op een roterend assenstelsel. De enige term in de energiefunctieaal die getransformeerd moet worden is dus de kinetische energie. Dit leidt tot volgende transformatie voor de hamiltoniaan,

$$\hat{H}_{rot} = \hat{H}_0 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (\text{A.2})$$

waarin  $\hat{\mathbf{L}}$  de draaiimpulsoperator is. We schrijven de laatste term met de draaiimpulsoperator even uit.

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} = -i\hbar\Omega_x \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) - i\hbar\Omega_y \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - i\hbar\Omega_z \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{A.3})$$

De totale Gross-Pitaevskii energiefunctieaal voor een roterend condensaat wordt dan gegeven door

$$\begin{aligned} E_{GP}[\Psi] &= \langle \Psi | \hat{H}_{rot} | \Psi \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Aangezien de golf functies complexe functies zijn, kunnen we de berekening van de GP-energiefunctionaal vereenvoudigen door over te gaan op de hydrodynamische beschrijving. Hierbij herschrijven we de golf functies als een modulus  $\rho(\mathbf{r})$  en een fase  $\theta(\mathbf{r})$ ,  $\Psi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) e^{i\theta(\mathbf{r})}$ . Dan wordt de deeltjesdichtheid gegeven door

$n(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})^2$ , de massadichtheid door  $mn(\mathbf{r}) = m\rho(\mathbf{r})^2$  en het superfluïde snelheidsveld door  $\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla_{\mathbf{r}} [\theta(\mathbf{r})]$ .

In de hydrodynamische beschrijving hebben we eerder de continuïteitsvergelijking (1.25) afgeleid. Deze moeten we ook aanpassen aan het roterende assenstelsel. Omdat de snelheid  $\mathbf{v}_{s,rot}$  in het meeroterende assenstelsel gerelateerd is aan de snelheid  $\mathbf{v}_s$  in het niet-roterende assenstelsel via  $\mathbf{v}_{s,rot} = \mathbf{v}_s - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})$ , wordt de aangepaste continuïteitsvergelijking in het niet-roterende assenstelsel gegeven door

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{v}_s - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}))] = 0 \quad (\text{A.5})$$

Als we dit verder uitwerken, wordt dit

$$\frac{\partial n}{\partial t} + n(\nabla \cdot \mathbf{v}_s) + (\nabla n) \cdot \mathbf{v}_s - (\nabla n) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.6})$$

Hiermee zullen we later de uitdrukking voor de totale energie kunnen vereenvoudigen. We werken nu eerst alle afzonderlijke termen van de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal verder uit in de hydrodynamische beschrijving.

## A.1 Kinetische energie

De kinetische energie wordt gegeven door

$$\begin{aligned} E_{kin} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \rho e^{-i\theta} \nabla^2 [\rho e^{i\theta}] \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Uitgewerkt levert dit

$$E_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \left[ \rho (\nabla^2 \rho) + 2i\rho (\nabla\theta) (\nabla\rho) + i\rho^2 (\nabla^2\theta) - \rho^2 (\nabla\theta)^2 \right] \quad (\text{A.8})$$

We verzamelen alle reële en imaginaire delen.

$$\begin{aligned} \text{Re}[E_{kin}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \left[ \rho (\nabla^2 \rho) - \rho^2 (\nabla\theta)^2 \right] \\ &= \int d\mathbf{r} \left[ \frac{1}{2m} |-i\hbar\nabla\rho|^2 + \frac{1}{2} m\rho^2 v_s^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

De eerste term is de kwantumdruk; deze hebben we bekomen door partiële integratie. De tweede term is de kinetische energie van de superfluïde stroom. Het imaginaire deel wordt gegeven door

$$\begin{aligned} \text{Im}[E_{kin}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} [(\nabla\theta) (\nabla\rho^2) + \rho^2 (\nabla^2\theta)] \\ &= -\frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} [(\nabla n) \cdot \mathbf{v}_s + n(\nabla \cdot \mathbf{v}_s)] \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Hierin herkennen we een aantal termen uit de continuïteitsvergelijking (A.6). Deze termen zullen later blijken weg te vallen met enkele andere termen.

## A.2 Rotatie energie

De term in de energie die afkomstig is van de coördinatentransformatie naar het meeroterende assenstelsel, wordt gegeven door

$$\begin{aligned} E_{rot} &= \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} \rho e^{-i\theta} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \rho e^{i\theta} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$



In (A.3) hebben we de operator  $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}$  verder uitgeschreven. Deze kunnen we nu toepassen op  $\rho e^{i\theta}$ . Uitgewerkt geeft dit

$$\begin{aligned} E_{rot} &= i\hbar\Omega_x \int d\mathbf{r} \rho \left( y \frac{\partial \rho}{\partial z} - z \frac{\partial \rho}{\partial y} + i\rho y \frac{\partial \theta}{\partial z} - i\rho z \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) \\ &+ i\hbar\Omega_y \int d\mathbf{r} \rho \left( z \frac{\partial \rho}{\partial x} - x \frac{\partial \rho}{\partial z} + i\rho z \frac{\partial \theta}{\partial x} - i\rho x \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \\ &+ i\hbar\Omega_z \int d\mathbf{r} \rho \left( x \frac{\partial \rho}{\partial y} - y \frac{\partial \rho}{\partial x} + i\rho x \frac{\partial \theta}{\partial y} - i\rho y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Dit kunnen we nog herschrijven en herschikken.

$$\begin{aligned} E_{rot} &= -m \int d\mathbf{r} \rho^2 [\Omega_x (yv_z - zv_y) + \Omega_y (zv_x - xv_z) + \Omega_z (xv_y - yv_x)] \\ &+ i\hbar \int d\mathbf{r} \rho \left[ \frac{\partial \rho}{\partial x} (\Omega_y z - \Omega_z y) + \frac{\partial \rho}{\partial y} (\Omega_z x - \Omega_x z) + \frac{\partial \rho}{\partial z} (\Omega_x y - \Omega_y x) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Hierin kunnen we twee scalaire producten van een vector met een vectoriël product herkennen. De rotatie energie vereenvoudigt zich dus tot

$$\begin{aligned} E_{rot} &= -m \int d\mathbf{r} \rho^2 [\mathbf{v}_s \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] + i\hbar \int d\mathbf{r} \rho (\nabla \rho) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \\ &= -m \int d\mathbf{r} \rho^2 [\mathbf{v}_s \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] + i\frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} (\nabla n) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

In het imaginaire deel herkennen we een volgende term uit de continuïteitsvergelijking (A.6). Ook deze term zal later blijken weg te vallen.

### A.3 Totale energie

Als we nu de verschillende termen (A.9), (A.10) en (A.14) samen met enkele eenvoudige termen zonder gradiënten verzamelen, bekommen we voor de totale Gross-Pitaevskii energie in een roterend assenstelsel

$$\begin{aligned} E_{GP}[\rho, \theta] - \mu N &= \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2m} | -i\hbar \nabla \rho |^2 + \frac{1}{2} m \rho^2 v_s^2 - m \rho^2 [\mathbf{v}_s \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] \right\} \\ &- \frac{i\hbar}{2} \int d\mathbf{r} [(\nabla n) \cdot \mathbf{v}_s + n (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) - (\nabla n) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] \\ &+ \int d\mathbf{r} \left[ V(\mathbf{r}) - \mu + \frac{g}{2} \rho^2 \right] \rho^2 \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Hierbij hebben we reeds de term  $-\mu N$  in de energiefunctonaal verwerkt. Deze moeten we mee minimaliseren om de randvoorwaarde dat het aantal deeltjes constant blijft mee in rekening te brengen. We kunnen nu deze uitdrukking voor de energie nog verder vereenvoudigen.

In de eerste lijn in (A.15) kunnen we de kinetische energie van de stromen herschrijven door het kwadraat te vervolledigen.

$$\frac{1}{2} m \rho^2 v_s^2 - m \rho^2 [\mathbf{v}_s \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] = \frac{1}{2} m \rho^2 [\mathbf{v}_s - (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 - \frac{1}{2} m \rho^2 (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \quad (\text{A.16})$$

De laatste term is niets anders dan het inertiemoment:

$$-\frac{1}{2} m \int d\mathbf{r} \rho^2 (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})^2 = -\frac{1}{2} \Omega^2 \int d\mathbf{r} m \rho^2 (\mathbf{e}_\Omega \times \mathbf{r})^2 = -\frac{1}{2} \Omega^2 \langle \hat{I} \rangle \quad (\text{A.17})$$

De bijdrage van het inertiemoment is een centrifugale parabolische potentiaal, die de wolk doet uitzetten in de richting loodrecht op de rotatie-as, omdat het daar de opsluitingspotentiaal verzwakt. We kunnen dit stuk dus op gelijke voet behandelen als de opsluitingspotentiaal.

De tweede lijn in (A.15) kunnen we nul stellen dankzij de continuïteitsvergelijking, gecombineerd met de randvoorwaarde dat het totale aantal deeltjes  $N$  constant blijft.

$$-\int d\mathbf{r} (\nabla n) \cdot \mathbf{v}_s + n (\nabla \cdot \mathbf{v}_s) - (\nabla n) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial N}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.18})$$

Als we al deze vereenvoudigingen in de Gross-Pitaevskii energiefunctonaal invullen, bekomen we

$$E_{GP}[\rho, \theta] - \mu N = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2m} | -i\hbar \nabla \rho |^2 + \frac{1}{2} m \rho^2 [\mathbf{v}_s - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})]^2 \right\} + \int d\mathbf{r} \left[ (\tilde{V}(\mathbf{r}) - \mu) + \frac{g}{2} \rho^2 \right] \rho^2 \quad (\text{A.19})$$

met

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) - \frac{m}{2} (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 \quad (\text{A.20})$$

De eerste term is de kwantumdruk: de energie nodig om de modulus van de condensaatgolffunctie te verbuigen. De tweede term is de kinetische energie van het condensaat in het roterende assenstelsel. De derde en vierde term zijn interactietermen. De derde term is de energie nodig om de condensaatdeeltjes in de invangingspotentialiaal in te vangen, waarbij de chemische potentialiaal het totale aantal deeltjes vastlegt. De vierde term is te wijten aan interatomaire interacties. Merk op dat we in  $\tilde{V}$  niet alleen de invangingspotentialiaal, maar ook de centrifugale potentialiaal  $-\frac{m}{2} (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2$  van de term met het inertiemoment hebben geabsorbeerd.

## Bijlage B

# Gross-Pitaevskii energiefunctionaal in pseudospin notatie

We willen de Gross-Pitaevskii energiefunctionaal voor een tweecomponentscondensaat uit (2.1)

$$\begin{aligned}
E_{GP} [\Psi_1, \Psi_2] = & \int d\mathbf{r} \Psi_1^* (\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_1 (\mathbf{r}) + \frac{g_{11}}{2} |\Psi_1 (\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_1 (\mathbf{r}) \\
& + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* (\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_2 (\mathbf{r}) + \frac{g_{22}}{2} |\Psi_2 (\mathbf{r})|^2 - \boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_2 (\mathbf{r}) \\
& + \int d\mathbf{r} g_{12} |\Psi_1 (\mathbf{r})|^2 |\Psi_2 (\mathbf{r})|^2 \\
& - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R [\Psi_1^* (\mathbf{r}) \Psi_2 (\mathbf{r}) + \Psi_1 (\mathbf{r}) \Psi_2^* (\mathbf{r})]
\end{aligned} \tag{B.1}$$

omzetten in de spinornotatie uit (2.16).

$$\Psi (\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1 (\mathbf{r}) \\ \Psi_2 (\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \rho_T (\mathbf{r}) e^{i\theta_T (\mathbf{r})} \begin{pmatrix} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix} (\mathbf{r})}{2} \right] e^{-i \frac{\phi (\mathbf{r})}{2}} \\ \sin \left[ \frac{\alpha_{mix} (\mathbf{r})}{2} \right] e^{i \frac{\phi (\mathbf{r})}{2}} \end{pmatrix} \tag{B.2}$$

Vervolgens zullen we de hoeken  $\alpha_{mix}$  en  $\phi$  omzetten naar onze pseudospin notatie uit (2.23).

$$\begin{cases} S_x = \sin \alpha_{mix} \cos \phi \\ S_y = \sin \alpha_{mix} \sin \phi \\ S_z = \cos \alpha_{mix} \end{cases} \tag{B.3}$$

We beginnen eerst met het herorganiseren van de termen.

$$\begin{aligned}
E_{GP} [\Psi_1, \Psi_2] = & \int d\mathbf{r} \Psi_1^* (\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \Psi_1 (\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* (\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \Psi_2 (\mathbf{r}) \\
& + \int d\mathbf{r} \Psi_1^* (\mathbf{r}) V_1 (\mathbf{r}) \Psi_1 (\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* (\mathbf{r}) V_2 (\mathbf{r}) \Psi_2 (\mathbf{r}) \\
& + \frac{g_{11}}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi_1 (\mathbf{r})|^4 + \frac{g_{22}}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi_2 (\mathbf{r})|^4 + g_{12} \int d\mathbf{r} |\Psi_1 (\mathbf{r})|^2 |\Psi_2 (\mathbf{r})|^2 \\
& + \int d\mathbf{r} \Psi_1^* (\mathbf{r}) \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_1 (\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* (\mathbf{r}) \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_2 (\mathbf{r}) \\
& - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R [\Psi_1^* (\mathbf{r}) \Psi_2 (\mathbf{r}) + \Psi_1 (\mathbf{r}) \Psi_2^* (\mathbf{r})]
\end{aligned} \tag{B.4}$$

De eerste lijn is de kinetische energie  $E_{kin}$  van het condensaat, de tweede lijn is de potentiële energie  $E_{pot}$  van het condensaat in de val, de derde de interatomaire interactie energie  $E_{int}$ , de vierde de rotatie energie  $E_{rot}$  en de vijfde de koppelingenergie  $E_R$ . We werken elk van deze termen afzonderlijk uit. Om onze notatie te vereenvoudigen laten we de afhankelijkheid van de functies van de plaatsvector  $\mathbf{r}$  verder weg.

## B.1 Kinetische energie

De kinetische energie wordt gegeven door

$$\begin{aligned}
E_{kin} &= \int d\mathbf{r} \Psi_1^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \Psi_1 + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \Psi_2 \\
&= \int d\mathbf{r} \left( \rho_T e^{-i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \right) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \left( \rho_T e^{i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \right) \\
&\quad + \int d\mathbf{r} \left( \rho_T(\mathbf{r}) e^{-i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \right) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\} \left( \rho_T e^{i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \right) \quad (B.5)
\end{aligned}$$

We moeten nu twee keer een dubbele afgeleide laten inwerken op een product van vier functies. Na vereenvoudiging, levert dit

$$\begin{aligned}
\text{Re}[E_{kin}] &= \frac{1}{2m} \int d\mathbf{r} |-i\hbar \nabla \rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 (\nabla \theta_T)^2 \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [(\nabla \alpha_{mix})^2 + (\nabla \phi)^2] \\
&\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \cos \alpha_{mix} (\nabla \theta_T) (\nabla \phi) \quad (B.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Im}[E_{kin}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} [(\nabla \rho_T^2) (\nabla \theta_T) + \rho_T^2 \nabla^2 \theta_T] \\
&\quad - \frac{\hbar^2}{4m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\sin[\alpha_{mix}] (\nabla \alpha_{mix}) (\nabla \phi) - \cos[\alpha_{mix}] \nabla^2 \phi] \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{4m} \int d\mathbf{r} \cos \alpha_{mix} (\nabla \rho_T^2) (\nabla \phi) \quad (B.7)
\end{aligned}$$

Hierbij hebben we dezelfde truck met de partiële afgeleide gebruikt als bij het ééncomponenten condensaat om de term met  $|-i\hbar \nabla \rho_T|^2$  in (A.9) af te leiden. Het imaginaire deel zal achteraf blijken weg te vallen via de continuïteitsvergelijking. We kunnen deze uitdrukking nu verder omzetten in de pseudospin notatie. Hiervoor werken we  $(\nabla \mathbf{S})^2$  uit en maken we gebruik van uitdrukking (2.17) voor de superfluïde snelheid.

$$\begin{aligned}
(\nabla \mathbf{S})^2 &= (\nabla S_x)^2 + (\nabla S_y)^2 + (\nabla S_z)^2 \\
&= (\nabla \alpha_{mix})^2 + \sin^2 \alpha_{mix} (\nabla \phi)^2 \quad (B.8)
\end{aligned}$$

Dit levert na wat omvormen

$$\text{Re}[E_{kin}] = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} |\nabla \rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 (\nabla \mathbf{S})^2 + \frac{m}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 \quad (B.9)$$

Het imaginaire deel hebben we hier niet omgevormd naar de pseudospin notatie, omdat dat later wegvalt tegenover andere termen.

## B.2 Potentiële energie

De potentiële energie van het condensaat in de val wordt gegeven door

$$\begin{aligned}
E_{pot} &= \int d\mathbf{r} \Psi_1^* V_1 \Psi_1 + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* V_2 \Psi_2 \\
&= \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \cos^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] V_1 + \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \sin^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] V_2 \quad (B.10)
\end{aligned}$$

Als we aannemen dat de invangspotential voor beide componenten gelijk is,  $V_1(\mathbf{r}) = V_2(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ , vereenvoudigt dit zich tot

$$E_{pot} = \int d\mathbf{r} \rho_T^2 V \quad (B.11)$$

Deze uitdrukking verandert niet in de pseudospin notatie.

### B.3 Interactie energie

We bekijken nu de term van de interatomaire interacties.

$$\begin{aligned} E_{int} &= \frac{g_{11}}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi_1|^4 + \frac{g_{22}}{2} \int d\mathbf{r} |\Psi_2|^4 + g_{12} \int d\mathbf{r} |\Psi_1|^2 |\Psi_2|^2 \\ &= \frac{g_{11}}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^4 \cos^4 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] + \frac{g_{22}}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^4 \sin^4 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] + g_{12} \int d\mathbf{r} \rho_T^4 \cos^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] \sin^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Om dit verder om te zetten naar de pseudospin notatie, gebruiken we

$$S_z = \cos \alpha_{mix} \Rightarrow \begin{cases} \cos^2 \left( \frac{\alpha_{mix}}{2} \right) = \frac{1}{2} (1 + S_z) \\ \sin^2 \left( \frac{\alpha_{mix}}{2} \right) = \frac{1}{2} (1 - S_z) \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Als we dit invullen in (B.12), bekomen we

$$\begin{aligned} E_{int} &= \int d\mathbf{r} \frac{\rho_T^4}{2} \left[ \frac{g_{11} + g_{22} + 2g_{12}}{4} + \frac{g_{11} - g_{22}}{2} S_z + \frac{g_{11} + g_{22} - 2g_{12}}{4} S_z^2 \right] \\ &= \int d\mathbf{r} \frac{\rho_T^4}{2} [c_0 + c_1 S_z + c_2 S_z^2] \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

met

$$c_0 = \frac{g_{11} + g_{22} + 2g_{12}}{4} \quad (\text{B.15})$$

$$c_1 = \frac{g_{11} - g_{22}}{2} \quad (\text{B.16})$$

$$c_2 = \frac{g_{11} + g_{22} - 2g_{12}}{4} \quad (\text{B.17})$$

### B.4 Rotatie energie

De volgende term die we bekijken is de rotatie energie.

$$\begin{aligned} E_{rot} &= \int d\mathbf{r} \Psi_1^* \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_1 + \int d\mathbf{r} \Psi_2^* \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \Psi_2 \\ &= \int d\mathbf{r} \rho_T e^{-i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \rho_T e^{i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \rho_T e^{-i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \rho_T e^{i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

met

$$-\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\Omega_x \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + i\hbar\Omega_y \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + i\hbar\Omega_z \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (\text{B.19})$$

We kunnen dit splitsen in verschillende termen via

$$\begin{aligned} &f_1^* (\rho_T, \theta_T) f_2^* (\alpha_{mix}, \phi) \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} f_1 (\rho_T, \theta_T) f_2 (\alpha_{mix}, \phi) \\ &= f_1^* (\rho_T, \theta_T) |f_2 (\alpha_{mix}, \phi)|^2 \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} f_1 (\rho_T, \theta_T) \\ &\quad + |f_1 (\rho_T, \theta_T)|^2 f_2^* (\alpha_{mix}, \phi) \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} f_2 (\alpha_{mix}, \phi) \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} E_{rot} &= \int d\mathbf{r} \rho_T e^{-i\theta_T} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \rho_T e^{i\theta_T} \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \left\{ -\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right\} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

We zullen de eerste term als voorbeeld behandelen. We noemen deze term  $I_1$ . De uitwerking van de andere twee termen is analoog. Deze noemen we  $I_2$  en  $I_3$ . We laten eerst de operator  $\{-\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\}$  inwerken op  $\rho_T e^{i\theta_T}$ .

$$I_1 = \int d\mathbf{r} \rho_T e^{-i\theta_T} \{-\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{L}}\} \rho_T e^{i\theta_T} \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned} &= i\hbar\Omega_x \int d\mathbf{r} \rho_T \left( y \frac{\partial \rho_T}{\partial z} - z \frac{\partial \rho_T}{\partial y} + i\rho_T y \frac{\partial \theta_T}{\partial z} - i\rho_T z \frac{\partial \theta_T}{\partial y} \right) \\ &+ i\hbar\Omega_y \int d\mathbf{r} \rho_T \left( z \frac{\partial \rho_T}{\partial x} - x \frac{\partial \rho_T}{\partial z} + i\rho_T z \frac{\partial \theta_T}{\partial x} - i\rho_T x \frac{\partial \theta_T}{\partial z} \right) \\ &+ i\hbar\Omega_z \int d\mathbf{r} \rho_T \left( x \frac{\partial \rho_T}{\partial y} - y \frac{\partial \rho_T}{\partial x} + i\rho_T x \frac{\partial \theta_T}{\partial y} - i\rho_T y \frac{\partial \theta_T}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Vervolgens veranderen we de volgorde van de termen, waarbij we de afgeleiden voorop zetten.

$$\begin{aligned} I_1 &= -\hbar \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \left[ \frac{\partial \theta_T}{\partial x} (\Omega_y z - \Omega_z y) + \frac{\partial \theta_T}{\partial y} (\Omega_z x - \Omega_x z) + \frac{\partial \theta_T}{\partial z} (\Omega_x y - \Omega_y x) \right] \\ &+ i\hbar \int d\mathbf{r} \rho_T \left[ \frac{\partial \rho_T}{\partial x} (\Omega_y z - \Omega_z y) + \frac{\partial \rho_T}{\partial y} (\Omega_z x - \Omega_x z) + \frac{\partial \rho_T}{\partial z} (\Omega_x y - \Omega_y x) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Deze uitdrukkingen hebben de vorm van een scalair product van de gradiënt van een functie met een vectoriël product, zodat

$$I_1 = -\hbar \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\nabla \theta_T \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] + i\hbar \int d\mathbf{r} \rho_T \nabla \rho_T \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \quad (\text{B.25})$$

De uitwerking van de andere twee termen is volledig analoog en levert

$$I_2 = \frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \cos^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] [\nabla \phi \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{4} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \sin [\alpha_{mix}] \nabla \alpha_{mix} \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \quad (\text{B.26})$$

$$I_3 = -\frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \sin^2 \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] [\nabla \phi \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] + \frac{i\hbar}{4} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \sin [\alpha_{mix}] \nabla \alpha_{mix} \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \quad (\text{B.27})$$

De totale rotatie energie wordt dus

$$E_{rot} = -\hbar \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \left[ \left( \nabla \theta_T - \frac{1}{2} \cos \alpha_{mix} \right) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \right] + \frac{i\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \nabla (\rho_T^2) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \quad (\text{B.28})$$

Om deze term om te vormen naar de pseudospin notatie, maken we gebruik van uitdrukking (2.17) voor  $\mathbf{v}_{s,eff}$ .

$$E_{rot} = -m \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r})] + \frac{i\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \nabla (\rho_T^2) \cdot (\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}) \quad (\text{B.29})$$

## B.5 Koppelingsenergie

We werken nu de koppelingsenergie  $E_R$  uit. Deze term is enkel aanwezig als beide componenten in elkaar omgezet kunnen worden.

$$\begin{aligned} E_R &= - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R [\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*] \\ &= - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R \left[ \rho_T e^{-i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \rho_T e^{i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{i\frac{\phi}{2}} \right. \\ &\quad \left. + \rho_T e^{i\theta_T} \cos \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \rho_T e^{-i\theta_T} \sin \left[ \frac{\alpha_{mix}}{2} \right] e^{-i\frac{\phi}{2}} \right] \\ &= - \int d\mathbf{r} \hbar \omega_R \rho_T^2 \sin [\alpha_{mix}] \cos \phi \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Omzetting naar de pseudospin notatie levert

$$E_R = -\hbar \omega_R \int d\mathbf{r} \rho_T^2 S_x \quad (\text{B.31})$$

## B.6 Totale energie

We kunnen nu alle afzonderlijke termen samenvoegen. Dit geeft ons een uitdrukking voor de totale energie.

$$\begin{aligned}
\text{Re}[E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}]] &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} |\nabla \rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 (\nabla \mathbf{S})^2 + \frac{m}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 \\
&+ \int d\mathbf{r} \rho_T^2 V + \int d\mathbf{r} \frac{\rho_T^4}{2} [c_0 + c_1 S_z + c_2 S_z^2] \\
&- m \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})] - \hbar \omega_R \int d\mathbf{r} \rho_T^2 S_x
\end{aligned} \tag{B.32}$$

$$\begin{aligned}
\text{Im}[E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}]] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} [(\nabla \rho_T^2) (\nabla \theta_T) + \rho_T^2 \nabla^2 \theta_T] \\
&- \frac{\hbar^2}{4m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\sin[\alpha_{mix}] (\nabla \alpha_{mix}) (\nabla \phi) - \cos[\alpha_{mix}] \nabla^2 \phi] \\
&+ \frac{\hbar^2}{4m} \int d\mathbf{r} \cos \alpha_{mix} (\nabla \rho_T^2) (\nabla \phi) \\
&+ \frac{\hbar}{2} \int d\mathbf{r} \nabla (\rho_T^2) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})
\end{aligned} \tag{B.33}$$

Het imaginaire deel is nul. Dit kunnen we aantonen via de continuïteitsvergelijking. In een roterend assenstelsel is deze gegeven door

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot [n(\mathbf{v}_s - (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}))] = 0 \tag{B.34}$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial n}{\partial t} + n(\nabla \cdot \mathbf{v}_{s,eff}) + (\nabla n) \cdot \mathbf{v}_{s,eff} - (\nabla n) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}) = 0 \tag{B.35}$$

Gebruik makend van de uitdrukkingen voor  $n$  en  $\mathbf{v}_{s,eff}$  in de spinor notatie, kunnen we dit herschrijven tot

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_T^2}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{m} [\rho_T^2 \nabla^2 \theta_T + (\nabla \rho_T^2) (\nabla \theta_T)] \\
&- \frac{\hbar}{2m} \rho_T^2 [\sin[\alpha_{mix}] (\nabla \alpha_{mix}) (\nabla \phi) - \cos[\alpha_{mix}] \nabla^2 \phi] \\
&+ \frac{\hbar}{2m} \cos[\alpha_{mix}] (\nabla \rho_T^2) (\nabla \phi) + (\nabla \rho_T^2) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})
\end{aligned} \tag{B.36}$$

Integratie over  $\mathbf{r}$  levert

$$0 = \frac{\partial N}{\partial t} = \int d\mathbf{r} \frac{\partial \rho_T^2}{\partial t} = \frac{\hbar}{2} \text{Im}[E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}]] \tag{B.37}$$

$$\Leftrightarrow \text{Im}[E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}]] = 0 \tag{B.38}$$

Dit wil zeggen dat de totale Gross-Pitaevskii energie functionaal voor een tweecomponentscondensaat gegeven wordt door het reële deel (B.32), zodat

$$\begin{aligned}
E_{GP}[\rho_T, \theta_T, \mathbf{S}] &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{r} |\nabla \rho_T|^2 + \frac{\hbar^2}{8m} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 (\nabla \mathbf{S})^2 + \frac{m}{2} \int d\mathbf{r} \rho_T^2 \mathbf{v}_{s,eff}^2 \\
&+ \int d\mathbf{r} \rho_T^2 V + \int d\mathbf{r} \frac{\rho_T^4}{2} [c_0 + c_1 S_z + c_2 S_z^2] \\
&- m \int d\mathbf{r} \rho_T^2 [\mathbf{v}_{s,eff} \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})] - \hbar \omega_R \int d\mathbf{r} \rho_T^2 S_x
\end{aligned} \tag{B.39}$$

Hierbij hebben we aangenomen dat de massa van de deeltjes en de interactiepotentiaal van beide componenten gelijk is.





# Bibliografie

- [1] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein Condensates in Dilute gases*, (Cambridge University press, 2002).
- [2] P. W. Anderson and N. Itoh, *Pulsar glitches and restlessness as a hard superfluidity phenomenon*, Nature (London) **256**, 25 (1975).
- [3] V. V. Moshchalkov *et al.*, *Type-1.5 Superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **102**, 117001 (2009).
- [4] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics, A Set of Lectures*, (The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1972).
- [5] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin, *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*, Nature **426**, 537 (2003); S. Jochim *et al.*, *Bose-Einstein Condensation of Molecules*, Science **302**, 2101 (2003); M. W. Zwierlein *et al.*, *Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules*, Phys. Rev. Lett. **91**, 250401 (2003).
- [6] D. M. Stamper-Kurn *et al.*, *Reversible formation of a Bose-Einstein condensate*, Phys. Rev. Lett. **81**, 2194-2197 (1998).
- [7] D. Pines and M. Ali Alpar, *Superfluidity in neutron stars*, Nature **316**, 27 (1985).
- [8] L. P. Pitaevskii, *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 646 (1961).  
L. P. Pitaevskii, *Vortex lines in an imperfect Bose gas*, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961).
- [9] E. P. Gross, *Structure of a quantized vortex in boson systems*, Nuovo Cimento **20**, 454 (1961).
- [10] L. P. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, (Clarendon Press, UK, 2004).
- [11] T. Skyrme, *A Non-Linear Field Theory*, Proc. R. Soc. A **260**, 127 (1961).
- [12] M.R. Matthews *et al.*, *Vortices in a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2498 (1999).
- [13] A. E. Leanhardt *et al.*, *Coreless Vortex Formation in a Spinor Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **89**, 190403 (2002).
- [14] D.-H. Lee and C. L. Kane, *Boson-vortex-Skyrmion duality, spin-singlet fractional quantum Hall effect, and spin-1/2 anyon superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **64**, 1313 (1990).
- [15] P. W. Anderson and G. Toulouse, *Phase Slippage without Vortex Cores: Vortex Textures in Superfluid  $^3\text{He}$* , Phys. Rev. Lett. **38**, 508 (1977).
- [16] K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Vortices in multicomponent Bose-Einstein condensates*, Int. J. Mod. Phys. B **19**, 1835 (2005).
- [17] <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~nrc25/SEMINARS/skybec.pdf>
- [18] F. Chevy and J. Dalibard, *Rotating Bose-Einstein Condensates*, Europhys. News **37**, 12 (2006).
- [19] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels and W. Ketterle, *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*, Science **292** 476 (2001).

- [20] K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, *Spin textures in rotating two-component Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **71**, 043611 (2005).
- [21] K. W. Schwarz, *Generation of Superfluid Turbulence Deduced from Simple Dynamical Rules*, Phys. Rev. Lett. **49**, 283 (1982).
- [22] H. Lamb, *Hydrodynamics*, (Dover Publications, 1945).