



Universiteit
Antwerpen

Faculteit Wetenschappen
Departement Fysica

Academiejaar 2008-2009

**Grondtoestandseigenschappen
van een polaron in een
Bose-Einstein condensaat**

Wim Casteels

Promotor : Prof. Dr. J. Tempere

Masterthesis ingediend met het oog op het behalen van de
graad van Master in de Fysica

Woord vooraf

Het is een feit dat het schrijven van een thesis iets is dat je niet alleen doet, maar dat tot stand komt met de hulp van andere mensen. Graag zou ik hier dan ook de kans willen nemen om de mensen te bedanken zonder wie deze thesis nooit mogelijk was geweest.

Vooreerst wil ik mijn promotor, Prof. Dr. J. Tempere, danken voor de vele inzichten die hij mij verschaft heeft op het gebied van vele fysische aspecten, met de theorie van Bose-Einstein condensatie en polaronen in het bijzonder. Het meest bijzondere aan de discussies die we samen hadden vond ik dat hij concepten waar ik reeds talloze uren mee zat te worstelen in boeken kon laten overkomen alsof het kinderspel was.

Dan ben ik ook veel dank verschuldigd aan mijn ouders, Mieke en Paul. Zij hebben mij de kansen gegeven om te doen wat ik doe, wat veel verder gaat dan enkel mijn studies. Ook zou ik ons moeder nog eens extra willen bedanken om zich te willen verdiepen in mijn thesis om de initieel talrijke dt-fouten en aanverwanten op te sporen.

Verder nog een dankwoordje voor mijn broer en zussen, vooral Anneke dan, met wie ik veel diepgaande discussies over Bose-Einstein condensatie heb gehouden.

Ook de tweede nalezer, Bob Schoeters, wil ik nog bedanken.

Tenslotte ben ik ook de mensen van de scouts 32/48 enige dank verschuldigd, vooral voor het leveren van een uitzonderlijk vruchtbare studieplaats, dankzij dewelke het gruwelijke concept van tweede zit me nog onbekend is.

Inhoudsopgave

Woord vooraf	1
1 Inleiding	4
1.1 Bose-Einstein condensatie	4
1.2 Het polaron effect	5
1.3 Een polaron in een Bose-Einstein condensaat	7
2 Interacties in ultrakoude gassen	9
2.1 Twee botsende deeltjes als een verstrooiingsproces	9
2.2 Verstrooiing en de verstrooiingslengte	9
2.3 Interactiepotentiaal	11
2.4 Relatie tussen de verstrooiingslengte en de interactiepotentiaal	11
3 Hamiltoniaan en de Bogoliubov benadering	14
3.1 De Hamiltoniaan	14
3.2 De Bogoliubov benadering	16
3.3 Harmonische operatoren en het Bogoliubov spectrum	19
3.4 Generische polaron Hamiltoniaan	21
4 Sterke koppeling: variationele methode	23
4.1 Hamiltoniaan en product ansatz	23
4.2 Uitdrukking voor de energie	24
4.3 Grondtoestandsenergie	25
4.4 Reeksontwikkeling voor de energie	27
4.5 De grootte van het polaron	30
4.6 Andere golffuncties voor de onzuiverheid	33
5 Zwakke koppeling: tijdsafhankelijke perturbatietheorie	36
5.1 Uitdrukking voor de energie	36
5.2 Renormalisatie	40
5.3 Energie van de grondtoestand	41
5.4 Effectieve massa	42
5.5 Grootte van het polaron	43
5.6 Onzuiverheid met impuls	44
5.6.1 Energie	44
5.6.2 Levensduur	46

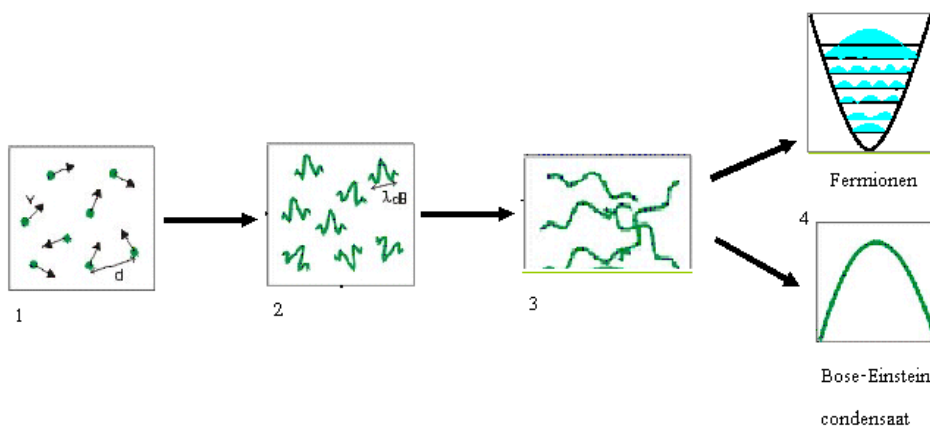
6	Variationele padintegraal methode	51
6.1	Formalisme	51
6.2	Actie van het systeem	53
6.3	Het modelsysteem en de Jensen-Feynman ongelijkheid	54
6.4	Jensen-Feynman ongelijkheid in dimensieloze eenheden	56
6.5	Renormalisatie van de contact-interactie	58
6.6	Cut-off voor de \tilde{k} -integraal	60
6.7	Zwakke koppeling limiet	61
6.8	Sterke koppeling limiet	62
6.9	Resultaten	64
6.9.1	Vrije energie	64
6.9.2	Effectieve massa	65
6.9.3	De grootte van het polaron	67
6.10	Conclusie	69
7	Experimentele realisatie	70
7.1	Algemeen	70
7.2	Wijzigen van de koppelingssterkte	71
7.2.1	Feshbach resonantie	72
7.3	Een lithium onzuiverheid in een natrium condensaat	73
7.4	Conclusie	75
8	Appendix: artikel in voorbereiding	77

1 Inleiding

1.1 Bose-Einstein condensatie

De naam Bose-Einstein condensatie is afkomstig van de Indische fysicus Satyendra Nath Bose en de wereldberoemde fysicus Albert Einstein. Het begon allemaal met een artikel van Bose in 1924 waarin hij een statistisch argument gebruikte om het spectrum van een zwarte straler te verklaren^{1.1}. Hij kreeg zijn werk echter niet gepubliceerd en verstuurde het naar Einstein, die het verder uitwerkte^{1.2}. Uit deze samenwerking is dan de Bose-Einstein statistiek ontstaan, welke gebruikt wordt om bosonen te beschrijven. Einstein merkte ook op dat als je de theorie toepast bij lage temperatuur, er uit volgt dat er een macroscopisch aantal atomen de laagste energie toestand gaat bezetten. Dit fenomeen staat bekend als Bose-Einstein condensatie (of ultrakoude gassen).

Het duurde echter nog tot 1995 voor men dit fenomeen experimenteel kon gaan meten. De reden is dat de temperatuur die men nodig heeft zo laag is dat er eerst nog enkele geavanceerde experimentele technieken moesten ontwikkeld worden. Voor deze prestatie ontvingen W. Ketterle, E. A. Cornell en C. E. Wiemann de nobelprijs in 2001.



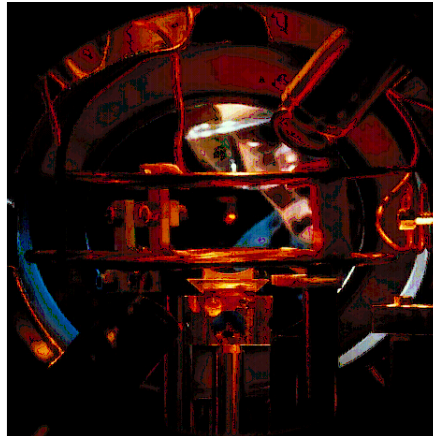
Figuur 1.1: Schematische voorstelling van de vorming van een Bose-Einstein condensaat.

In figuur 1.1 wordt schematisch weergegeven hoe een Bose-Einstein condensaat tot stand komt. Klassiek wordt een gas beschreven als botsende

^{1.1}S.N. Bose, Zeitschrift für Physik **26**, 178 (1924).

^{1.2}A. Einstein, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **1**, 3 (1925).

deeltjes met de kinetische gas theorie (1). Dan kwam de kwantum mechanica die stelde dat deeltjes een duaal gedrag hebben en ook als een golf kunnen beschreven worden (2). Als we een gas nu gaan afkoelen, en dus de impuls van de deeltjes verlagen, volgt uit de onzekerheidsrelatie van Heisenberg dat de onzekerheid op de positie zal toenemen, waardoor de golffuncties van de deeltjes elkaar uiteindelijk zullen overlappen (3). Na voldoende koeling zal het systeem een macroscopische kwantum toestand bezetten (4). Fermionen kunnen vanwege het exclusie principe van Pauli niet dezelfde toestand bezetten, waardoor de laagste toestanden zullen bezet worden. Dit geldt echter niet voor bosonen en zij kunnen dus allemaal in de laagste toestand terechtkomen, wat men aanduidt met een Bose-Einstein condensaat. In figuur 1.2 is een foto te zien van een wolkje ultrakoude atomen dat men afkoelt tot het een condensaat vormt.

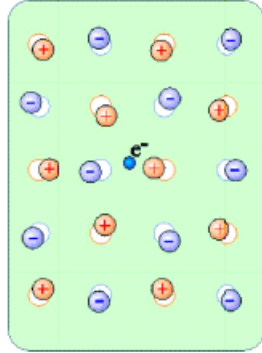


Figuur 1.2: Een wolkje natrium atomen in een magneto-optische val.

1.2 Het polaron effect

Het meest bekende polaron is het Fröhlich polaron, gevormd door een elektron in een ionair of polair kristalrooster. Door de negatieve lading van het elektron zal het de negatief geladen ionen afstoten en de positief geladen ionen aantrekken (zie figuur 1.3). De ionen zullen dus een beweging uitvoeren ten gevolge van de aanwezigheid van het elektron. Zo'n bewegingen van atomen of ionen in een kristalrooster beschrijft men door middel van fononen. In 1933 voerde Landau het polaron concept in, zijnde het elektron samen met de wolk van fononen errond^{1,3}. Fröhlich toonde aan dat men de

^{1,3}L.D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **3**, 664 (1933).



Figuur 1.3: Een elektron in een polair of ionair kristal.

Hamiltoniaan van dit systeem kan schrijven als:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_{LO} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\hat{r}} [\hat{b}_{\vec{k}} + \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger], \quad (1.1)$$

met $\hat{b}_{\vec{k}}$ de creatie operator van de fononen. De eerste term stelt de kinetische energie van de onzuiverheid met massa m voor, de tweede term beschrijft de fononen, met ω_{LO} de frequentie van de longitudinale optische fononen, en de derde term is de interactie, waarbij \hat{r} de positie operator van de onzuiverheid is. Uit de theorie van Frölich volgt dat de interactie amplitude gelijk is aan

$$V_{\vec{k}} = -i \frac{\sqrt{\hbar\omega_{LO}}}{k} \frac{2\pi e^2}{\sqrt{V}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (1.2)$$

met ϵ_∞ de permittiviteit en ϵ_0 de statische diëlektrische constante.

Wat voor ons van belang is, is dat we uitgaande van deze Frölich Hamiltoniaan een generische polaron Hamiltoniaan kunnen definiëren:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\hat{r}} [\hat{b}_{\vec{k}} + \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger], \quad (1.3)$$

deze stelt een onzuiverheid voor in een bad van bosonen, met $\epsilon_{\vec{k}}$ een veralgemeende dispersie van de bosonen en $V_{\vec{k}}$ de interactie amplitude tussen de onzuiverheid en de bosonen. Via deze Hamiltoniaan definiëren we een polaron systeem als elk systeem waarvan de Hamiltoniaan in de vorm (1.3) kan geschreven worden, met een systeemspecifieke dispersie en interactie amplitude. Deze Hamiltoniaan vindt men terug in vele takken van de fysica met uiteenlopende toepassingen, enkele voorbeelden zijn:

- een atoom in een elektromagnetisch veld (atoom- en molecuulfysica),
- een elektron gekoppeld aan roostertrillingen: het polaron (vaste stoffysica),
- nucleonen in interactie met een bad van mesonen (kernfysica),
- elektron-rippelon interactie op een heliumoppervlak (lage temperatuurfysica),
- de spin-boson Hamiltoniaan als model van dissipatieve systemen (statistische fysica).

1.3 Een polaron in een Bose-Einstein condensaat

Recent werd aangetoond dat we een onzuiverheid in een Bose-Einstein condensaat aan het lijstje van generische polaron systemen kunnen toevoegen^{1,4}. Door de uiteenlopende toepassingen is het generisch polaron systeem reeds uitgebreid bestudeerd, maar toch bestaan er nog enkele belangrijke openstaande vragen over dit generisch systeem. Zo vertoont de theorie voor sterke koppeling^{1,5} afwijkingen ten opzichte van wat men bekomt met Monte-Carlo^{1,6}. Een reden dat men nog niet heeft kunnen uitmaken welke beschrijving het meest correct is, is dat er tot nog toe geen systeem bestaat waarin de sterke koppeling voorkomt, men kan dus geen metingen doen in dit regime. Er zijn echter aanwijzingen dat men dit regime wel kan bereiken in een Bose-Einstein condensaat. De motivatie van deze thesis is de theoretische beschrijving van het polaron systeem in een Bose-Einstein condensaat, met het oog op de mogelijkheid om de sterke koppeling te meten.

Een voordeel aan werken met een Bose-Einstein condensaat is dat het een zuiver en aanpasbaar systeem is. Hierdoor zijn de experimentele metingen niet afhankelijk van aspecten die men niet in de hand heeft, zoals defecten, bijkomende excitatie modes, onbekende of onveranderlijke materiaalparameters, enz..

In deze thesis wordt een eerste stap gezet in de richting van de beschrijving van de generische polaron Hamiltoniaan in een Bose-Einstein condensaat, met name de eigenschappen van de grondtoestand worden afgeleid. Aangezien de interacties tussen de deeltjes heel belangrijk zijn, wijden we ons eerste hoofdstuk hieraan en leiden een uitdrukking voor de interactie

^{1,4}F. M. Cucchetti en E. Timmermans, Phys. Rev. Lett. **96**, 210401 (2006).

^{1,5}J.T. Devreese, J. De Sitter, M. Goovaerts, Phys.Rev.B **5**, 2367 (1972).

^{1,6}A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto en B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **91**, 236401 (2003).

amplitude af. Dan tonen we aan dat de Hamiltoniaan van ons systeem inderdaad in de generische vorm kan geschreven worden en leiden de specifieke dispersie en interactie amplitude van het systeem af. Vervolgens laten we er het reeds bestaande formalisme voor de generische polaron Hamiltoniaan op los. Eerst bekijken we de twee limietgevallen van sterke en zwakke koppeling, dit doen we respectievelijk met de variationele methode en perturbatie theorie. Uiteindelijk gebruiken we het door Feynman opgestelde formalisme van de variationele padintegraal methode voor een beschrijving die in alle regimes geldig is en kijken of deze consistent is met de eerder berekende resultaten voor de limiet gevallen. Dan passen we de theorie toe op het specifieke systeem van een lithium onzuiverheid in een natrium condensaat. Dit doen we omdat er een samenwerking is met het 'Kirchhoff Institute for Physics' aan de universiteit van Heidelberg, waar men experimenteel juist dit systeem tracht te bekijken. Tot slot kan men in de appendix het (momenteel nog in voorbereiding) artikel vinden dat uit deze thesis is ontstaan.

Tijdens de verschillende stappen worden er steeds enkele experimenteel meetbare grootheden afgeleid, zoals bijvoorbeeld de effectieve massa en de grootte van het polaron, om een duidelijke link met het experiment te houden.

2 Interacties in ultrakoude gassen

In een BEC zijn de afstanden tussen de deeltjes typisch van de orde 10^2nm , terwijl de verstrooiingslengte (zie verder) van de orde $100a_0$ (met $a_0 \approx 0.05\text{nm}$ de Bohrstraal) is. Dit duidt men aan door te zeggen dat het condensaat een kleine dichtheid heeft, waardoor men de interacties tussen de atomen kan beschouwen als botsingen tussen twee deeltjes.

2.1 Twee botsende deeltjes als een verstrooiingsproces

De Hamiltoniaan van twee deeltjes wordt gegeven door:

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|), \quad (2.1)$$

met V de potentiaal tussen de twee deeltjes, de eerste twee termen geven de kinetische energie van de deeltjes. We gaan nu over naar massacentrum en relatieve coördinaten:

Massacentrum coördinaten	relatieve coördinaten
$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$	$\vec{p} = \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2}$
$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}$	$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$
$M = m_1 + m_2$	$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$

(2.2)

De Hamiltoniaan wordt dan:

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m_r} + V(|\vec{r}|). \quad (2.3)$$

Deze Hamiltoniaan is duidelijk ontkoppeld. Het massacentrum gedraagt zich als een vrij deeltje. Het probleem is dan gereduceerd tot een verstrooiingsprobleem aan een bolsymmetrische potentiaal van een deeltje met massa m_r . Als de massa's van de twee deeltjes gelijk zijn vereenvoudigt de relatieve massa zich tot:

$$m_r = \frac{m}{2}. \quad (2.4)$$

2.2 Verstrooiing en de verstrooiingslengte

Zoals hierboven aangetoond kunnen de interacties tussen de deeltjes beschreven worden door een verstrooiingsprobleem, de Hamiltoniaan hiervoor kan geschreven worden als:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (2.5)$$

met \hat{H}_0 de kinetische energie operator en \hat{V} de potentiaal. Dit levert de Schrödinger-vergelijking:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (2.6)$$

Deze kan dan weer omgeschreven worden naar de Lippmann-Schwingervergelijking^{2.1}:

$$|\psi\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} V |\psi\rangle, \quad (2.7)$$

met $|\vec{k}\rangle$ de toestand van een vrij deeltje (vlakke golf). De factor $i\epsilon$ wordt toegevoegd om een singulariteit te vermijden. Na enig rekenwerk^{2.2} kan deze vergelijking op grote afstand van de verstrooier omgeschreven worden als:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}', \vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.8)$$

met $\vec{k}' = k\vec{r}/r$, een golfvector met dezelfde lengte als \vec{k} en gericht in de \vec{r} -richting, $f(\vec{k}', \vec{k})$ noemt men de verstrooiingsamplitude, gegeven door:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m_r v}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi \rangle, \quad (2.9)$$

waar v het volume voorstelt. Uit deze vergelijking zien we dus dat op grote afstand van de verstrooier de golffunctie bestaat uit een vlakke golf en een uitdeinende sferische golf. We kunnen nu gebruik maken van de s-golf benadering, welke geldig is bij lage energie en een bolsymmetrische potentiaal. Aangezien we in een Bose-Einstein condensaat werken bij zeer lage temperatuur zijn enkel processen bij lage energie belangrijk en hierboven merken we al op dat de potentiaal bolsymmetrisch is, in ons geval is dit dus een uitstekende benadering. Hieruit volgt dat we de verstrooiingsamplitude kunnen schrijven als:

$$f(\vec{k}', \vec{k} \rightarrow 0) = -a. \quad (2.10)$$

De potentiaal, en bijgevolg het volledige verstrooiingsprobleem, wordt dus bepaald door één parameter a , welke men de verstrooiingslengte noemt. Voor een afstotende potentiaal zal $a > 0$ zijn en in de meeste gevallen zal voor een attractieve potentiaal $a < 0$ zijn. Het blijkt ook dat voor een sterkere potentiaal a groter zal zijn. De verstrooiingslengte kan ook gezien worden als een faseverschuiving van de golffunctie ten gevolge van het verstrooiingsproces aan de potentiaal.

^{2.1}Voor de volledige uitwerking verwijzen we naar het hoofdstuk over verstrooiing in het boek Sakurai, J.J. *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison-Wesley, 1994.

^{2.2}Dit is terug te vinden in L.D. Landau, L.D. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, 3ed., Pergamon press, 1991.

2.3 Interactiepotentiaal

Zoals gezien hierboven wordt in de s-golf benadering het volledige verstrooiingsproces bepaald door de verstrooiingslengte. In dit geval kunnen we voor de interactiepotentiaal een pseudopotentiaal nemen, zo gekozen dat hij dezelfde verstrooiingslengte heeft als de echte potentiaal. De meest gebruikte pseudopotentiaal is de contactpotentiaal:

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.11)$$

Het gewicht g wordt dan zo gekozen dat de potentiaal de juiste verstrooiingslengte vertoont (zie verder). De Fourier getransformeerde van deze potentiaal is een constante (de positie van de verstrooiier wordt in de oorsprong beschouwd):

$$V_{\vec{k}} = \int d\vec{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} g\delta(\vec{r}) \quad (2.12)$$

$$= g. \quad (2.13)$$

2.4 Relatie tussen de verstrooiingslengte en de interactiepotentiaal

We definiëren de \hat{T} -operator (ook wel transitie operator genoemd) als volgt:

$$\hat{V}|\psi\rangle = \hat{T}|\vec{k}\rangle. \quad (2.14)$$

Hierdoor kan de verstrooiingsamplitude (zie vergelijking (2.9)) geschreven worden als:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m_r V}{4\pi\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle. \quad (2.15)$$

In de s-golf benadering vinden we dus volgende relatie tussen de \hat{T} -operator en de verstrooiingslengte:

$$\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r V}. \quad (2.16)$$

Als we nu de Lippmann-Schwinger vergelijking langs links vermenigvuldigen met deze \hat{T} -operator vinden we een andere populaire schrijfwijze voor deze vergelijking:

$$\hat{T}|\vec{k}\rangle = \hat{V}|\vec{k}\rangle + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}|\vec{k}\rangle. \quad (2.17)$$

Dit levert ons volgende operator identiteit:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{T}. \quad (2.18)$$

Als we deze vergelijking omzetten in impulsrepresentatie vinden we:

$$\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle = \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle + \sum_{\vec{k}'} \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle G(\vec{k}', \vec{k}') \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle, \quad (2.19)$$

met

$$G(\vec{k}', \vec{k}') = \langle \vec{k}' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} | \vec{k}' \rangle \quad (2.20)$$

$$= \frac{2m_r}{\hbar^2} \frac{\langle \vec{k}' | \vec{k}' \rangle}{k_0^2 - (k')^2 + i\epsilon}, \quad (2.21)$$

en

$$\langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} \quad (2.22)$$

$$= g. \quad (2.23)$$

Als eerste orde benadering kunnen we vergelijking (2.19) herschrijven als:

$$\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle = \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle + O(V^2), \quad (2.24)$$

Als we dit resultaat invullen in vergelijking (2.16) vinden we voor de Fourier getransformeerde van de potentiaal:

$$V_{\vec{k}} = g = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r V} \quad (2.25)$$

Tot op eerste orde is dit het gewicht dat we voor onze potentiaal moeten gebruiken om een correcte verstrooiingslengte te bekomen voor het probleem (herinner: het probleem is volledig bepaald door de verstrooiingslengte, dus dit zou ons de correcte resultaten opleveren, tot op eerste orde).

Er zal echter blijken dat eerste orde niet altijd voldoende zal zijn, tot tweede orde kunnen we de vergelijking (2.19) schrijven als:

$$\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k}_0 \rangle = \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle + \sum_{\vec{k}'} \langle \vec{k} | \hat{V} | \vec{k}' \rangle G(\vec{k}', \vec{k}') \langle \vec{k}' | \hat{V} | \vec{k}_0 \rangle + O(V^3). \quad (2.26)$$

Omdat we bij lage energie werken ($\vec{k}_0 \rightarrow 0$) kunnen we dit herschrijven als:

$$\langle \vec{k} | \hat{T} | \vec{k}_0 \rightarrow 0 \rangle = g - \sum_{\vec{k}'} g \frac{2m_r}{(\hbar k')^2} g. \quad (2.27)$$

Gebruik van vergelijking (2.16) levert ons nu:

$$\frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r V} = g - g^2 \sum_{\vec{k}'} \frac{2m_r}{(\hbar k')^2} \quad (2.28)$$

Tot op tweede orde kunnen we de Fourier getransformeerde van de potentiaal dus schrijven als:

$$V_{\vec{k}} = g = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r V} + g^2 \sum_{\vec{k}'} \frac{2m_r}{(\hbar k')^2}; \quad (2.29)$$

$$V_{\vec{k}}^2 = g^2 = \left(\frac{2\pi\hbar^2 a}{m_r V} \right)^2. \quad (2.30)$$

Merk op dat er in de uitdrukking voor $V_{\vec{k}}$ een divergentie voorkomt, hier zullen we later dankbaar gebruik van maken om de interactie-energie te renormaliseren.

3 Hamiltoniaan en de Bogoliubov benadering

In dit hoofdstuk bekijken we de Hamiltoniaan van een onzuiverheid in een Bose-Einstein condensaat. We gebruiken hiervoor het formalisme van tweede kwantisatie en de Bogoliubov benadering. We tonen aan dat de Hamiltoniaan kan geschreven worden in de generische vorm van een polaron Hamiltoniaan, met een specifieke dispersie en interactie amplitude.

3.1 De Hamiltoniaan

Het systeem dat we willen bekijken is een onzuiverheid in een Bose-Einstein condensaat (BEC). Aangezien dit een veeldeeltjes systeem is, is tweede kwantisatie het aangewezen formalisme. We beginnen met de beschrijving van een homogeen condensaat. In tweede kwantisatie wordt een systeem voorgesteld door de energieniveaus die de deeltjes kunnen bezetten. Elk niveau wordt aangeduid met het kwantumgetal \vec{k} , de golfvector (zie figuur 3.1). Nu kan men een systeem beschrijven door aan te duiden hoeveel deeltjes er in elk niveau zitten, dit doet men met de bezettingsgetallen: $n_{\vec{k}}$ is het aantal deeltjes in niveau \vec{k} . Een systeem wordt dan voorgesteld als: $|n_1 n_2 \dots n_{\vec{k}-1} n_{\vec{k}} n_{\vec{k}+1} \dots \rangle$, dit noemt men de bezettingsrepresentatie. De belangrijkste operators in tweede kwantisatie zijn de bosonische creatie operator $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ en de bosonische annihilatie operator $\hat{c}_{\vec{k}}$. Zoals de naam doet vermoeden zullen deze een deeltje creëren of annihileren^{3.1}. Hun werking op een systeem is:

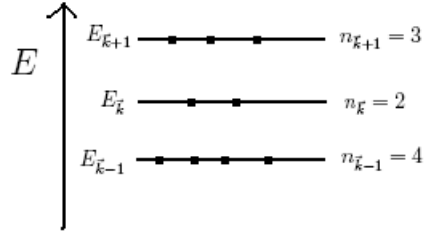
$$\begin{aligned} \hat{c}_{\vec{k}} |n_1 n_2 \dots n_{\vec{k}-1} n_{\vec{k}} n_{\vec{k}+1} \dots \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}}} |n_1 n_2 \dots n_{\vec{k}-1} (n_{\vec{k}} - 1) n_{\vec{k}+1} \dots \rangle, \\ \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger |n_1 n_2 \dots n_{\vec{k}-1} n_{\vec{k}} n_{\vec{k}+1} \dots \rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}} + 1} |n_1 n_2 \dots n_{\vec{k}-1} (n_{\vec{k}} + 1) n_{\vec{k}+1} \dots \rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

We kunnen deze twee operatoren ook combineren tot de teloperatoren, met als eigenwaarden de bezettingsgetallen: $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} = \hat{n}_{\vec{k}}$. We kunnen nu gemakkelijk een uitdrukking vinden voor de energie van ons systeem, deze is de som over de verschillende niveaus van het product van de energie met de teloperator:

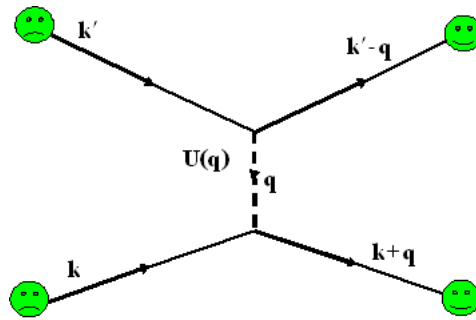
$$\hat{H}_{kin} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}. \quad (3.2)$$

Nu moeten we nog de interacties tussen de deeltjes in rekening brengen, dit is ook gemakkelijk uit te drukken in tweede kwantisatie. Bij een botsing zullen twee deeltjes met elkaar interageren en een nieuwe impuls krijgen, dit komt

^{3.1}Zie het hoofdstuk over tweede kwantisatie in de cursus *Kwantummechanica* van prof. dr. F. Brosens voor een gedetailleerdere beschrijving.



Figuur 3.1: Schematische voorstelling van de beschrijving van een veeldeeltjes systeem in tweede kwantisatie.



Figuur 3.2: Schematische voorstelling van de interactie tussen twee deeltjes.

neer op het annihileren van twee deeltjes, waarna er twee nieuwe deeltjes worden gecreëerd met een andere impuls, met een zekere amplitude $U(\vec{q})$ (zie figuur 3.2). In tweede kwantisatie is het deel van de Hamiltoniaan dat de interactie beschrijft dus gegeven door:

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} U(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}}, \quad (3.3)$$

waarbij het behoud van impuls nog in rekening werd gebracht. Uit de theorie van tweede kwantisatie volgt dat de amplitude voor een interactie $U(\vec{q})$ de Fourier getransformeerde van de interatomaire potentiaal is. Verder hebben we nog gesommeerd over alle mogelijke inkomende deeltjes \vec{k} en \vec{k}' en alle mogelijke uitwisselingen van impuls \vec{q} , de factor $1/2$ vermijdt het dubbeltellen van interacties.

Als we nu nog een onzuiverheid toevoegen vinden we dat de Hamiltoniaan van het systeem gegeven is door:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m_I} \\ &+ \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} U(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}} \\ &+ \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} U_I(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}}.\end{aligned}\quad (3.4)$$

De eerste lijn geeft de kinetische energie van de onzuiverheid in eerste kwantisatie. De tweede lijn is de Hamiltoniaan van een gas van bosonen, waarbij de kinetische energie van de bosonen gegeven is door:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_B} - \mu, \quad (3.5)$$

met μ de chemische potentiaal en $U(\vec{q})$ is de Fourier getransformeerde van de boson-boson interactie. De laatste term geeft de interactie tussen de onzuiverheid en de bosonen, we kunnen de dichtheid van de onzuiverheid nog schrijven als:

$$\sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} = \rho_I(\vec{q}) = \int d\vec{r} \exp(-i\vec{q}\cdot\vec{r}) \rho_I(\vec{r}) = \exp(-i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}), \quad (3.6)$$

met

$$\hat{\rho}_I(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}}), \quad (3.7)$$

waar $\hat{\vec{r}}$ de positie operator van de onzuiverheid is. In wat volgt zullen we steeds met een contactpotentiaal werken, in hoofdstuk 2 zagen we dat de effectieve interactie dan onafhankelijk is van \vec{k} , zodat we deze uit de som kunnen halen, we vinden dan voor de Hamiltoniaan:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} + \frac{U}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}} + U_I \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \hat{\rho}_I(\vec{q}). \quad (3.8)$$

3.2 De Bogoliubov benadering

We vereenvoudigen de Hamiltoniaan met behulp van de Bogoliubov benadering^{3.2}, deze is het gevolg van de eigenschap van een Bose-Einstein condensaat

^{3.2}N. N. Bogoliubov, J. Phys. Moscow **11**, 23 (1947).

dat bijna alle bosonen zich in de grondtoestand ($\vec{k} = 0$) bevinden en dat de werking van de creatie en annihilatie operatoren gegeven worden door (3.1). Aangezien bijna alle bosonen zich in de grondtoestand bevinden en N_0 dus veel groter is dan de andere bezettingsgetallen kunnen we bij benadering de werking van de creatie en annihilatie operatoren voor $\vec{k} = 0$ vervangen door $\hat{c}_0^\dagger = \hat{c}_0 = \sqrt{N_0}\hat{1}$, de andere creatie en annihilatie operatoren ($\vec{k} \neq 0$) zullen dan slechts een klein effect hebben. Hierdoor kunnen we bij benadering enkel de termen met maximaal twee creatie en annihilatie operatoren met $\vec{k} \neq 0$ bijhouden. We kijken wat dit geeft voor de verschillende termen van de Hamiltoniaan:

- **De kinetische term voor de bosonen:**

$$\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} = E_0 N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \quad (3.9)$$

De eerste term geeft de kinetische term van het homogene condensaat, de tweede term geeft de kinetische energie van de thermische atomen.

- **De interactieterm voor de bosonen:**

$$\begin{aligned} \frac{U}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}} \\ = \frac{U N_0^2}{2} + \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}}) + 2U N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

De eerste term geeft de interactie van het homogene condensaat, de andere termen zullen we nog verder uitwerken.

- **De interactie tussen de bosonen en de onzuiverheid:**

$$\begin{aligned} U_I \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \rho_I(\vec{q}) = U_I N_0 \rho_I(0) + \sqrt{N_0} U_I \sum_{\vec{q} \neq 0} \rho_I(\vec{q}) (\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{c}_{-\vec{q}}) \\ + U_I \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

De eerste term geeft de interactie van het homogene condensaat met de onzuiverheid. De laatste term is van de orde $\mathcal{O}(1)$, terwijl de eerste en de tweede term van de orde $\mathcal{O}(N_0)$ en $\mathcal{O}(N_0^{1/2})$ zijn, in de Bogoliubov benadering kunnen we deze term dus verwaarlozen.

We voeren nu nog de Gross Pitaevski energie in^{3.3,3.4}, welke de mean-field energie van het condensaat beschrijft:

$$E_{GP} = E_0 N_0 + \frac{1}{2} U N_0^2, \quad (3.12)$$

de eerste term geeft de kinetische energie van het homogene condensaat, de tweede is de energie ten gevolge van de interactie tussen de bosonen. Als we nu terug alles samenbrengen vinden we voor de Hamiltoniaan:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_{GP} + U_I N_0 + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} (E_{\vec{k}} + 2U N_0) \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} + \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}}) \\ & + \sqrt{N_0} U_I \sum_{\vec{q} \neq 0} \rho_I(\vec{q}) (\hat{c}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{c}_{-\vec{q}}), \end{aligned} \quad (3.13)$$

hierbij hebben we nog gebruik gemaakt van:

$$\rho_I(0) = \int d\vec{r} \rho_I(\vec{r}) = 1. \quad (3.14)$$

We werken vanaf nu met een nieuwe chemische potentiaal, welke de afwijking geeft van de mean-field waarde:

$$\tilde{\mu} = \mu - U N_0, \quad (3.15)$$

voor een homogeen gas zal deze nieuwe chemische potentiaal naar nul gaan^{3.5}. Om de Hamiltoniaan verder uit te werken hebben we volgende gelijkheid nodig:

$$\begin{aligned} & \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}} + \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger) (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{-\vec{k}}) \\ & = \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}} + \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}}) \\ & = \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}) + \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}} + \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger) \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} N_0 U + U N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} [\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} + \frac{1}{2} (\hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}} + \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger)], \end{aligned} \quad (3.16)$$

^{3.3}L.P. Pitaevskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **40**, 646 (1961).

^{3.4}E.P. Gross, Nuovo Cimento 20, 454 (1961); J. Math. Phys. 4, 195 (1963).

^{3.5}Dit volgt uit de mean-field beschrijving van het condensaat en is terug te vinden in hoofdstuk 6 van C.J. Pethick & H. Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases.*, Cambridge, 2002.

In de tweede gelijkheid gebruikten we dat een som over $-\vec{k}$ gelijk is aan een som over \vec{k} , de laatste stap volgt uit de commutatierelatie $\hat{c}_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger = 1 + \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger\hat{c}_{\vec{k}}$. De eerste term geeft nog een verschuiving in de energie van het condensaat, deze komt ook voor bij de beschrijving van een condensaat zonder onzuiverheid, we definiëren de Gross-Pitaevski-Bogoliubov energie als:

$$E_{GPB} = E_0 N_0 + \frac{1}{2} U N_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} N_0 U \quad (3.17)$$

De laatste term lijkt een divergerende energiebijdrage te leveren, maar om deze uit te rekenen moet men rekening houden met hogere orde termen van de Lippmann Schwinger^{3.6}. We kunnen dan uiteindelijk de Hamiltoniaan schrijven als:

$$\begin{aligned} \hat{H} = E_{GPB} + U_I N_0 + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} + \frac{U N_0}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (\hat{c}_{\vec{k}} + \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger) (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{-\vec{k}}) \\ \sqrt{N_0} U_I \sum_{\vec{k} \neq 0} \rho_I(-\vec{k}) (\hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{k}}), \end{aligned} \quad (3.18)$$

hierbij hebben we in de laatste term nog de substitutie $\vec{q} \rightarrow -\vec{k}$ gedaan om de beschrijving in het volgende te vergemakkelijken, de dichtheid is gegeven door (zie (3.6)):

$$\rho_I(-\vec{k}) = \exp(i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}}) \quad (3.19)$$

3.3 Harmonische operatoren en het Bogoliubov spectrum

We kunnen de Hamiltoniaan ook uitdrukken in functie van de harmonische operatoren, gegeven door:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2E_{\vec{k}}}} [\hat{c}_{\vec{k}} + \hat{c}_{-\vec{k}}^\dagger], \\ \hat{P}_{\vec{k}} &= -i \sqrt{\frac{E_{\vec{k}}}{2}} [\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger - \hat{c}_{-\vec{k}}], \end{aligned} \quad (3.20)$$

^{3.6}Zie hoofdstuk 8 in C.J. Pethick & H. Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, Cambridge, 2002.

waarvoor geldt: $\hat{Q}_{\vec{k}}^\dagger = \hat{Q}_{-\vec{k}}$, $\hat{P}_{\vec{k}}^\dagger = \hat{P}_{-\vec{k}}$ en $[\hat{Q}_{\vec{k}}, \hat{P}_{\vec{k}'}] = i\delta(\vec{k} - \vec{k}')$. De creatie en annihilatie operatoren kunnen dan geschreven worden als:

$$\begin{aligned}\hat{c}_{\vec{k}} &= \frac{1}{2}(\sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}} - i\sqrt{\frac{2}{E_{\vec{k}}}}\hat{P}_{\vec{k}}^\dagger), \\ \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger &= \frac{1}{2}(\sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}}^\dagger + i\sqrt{\frac{2}{E_{\vec{k}}}}\hat{P}_{\vec{k}}).\end{aligned}\quad (3.21)$$

Dit geeft voor de kinetische energie term van de thermische bosonen:

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} (\sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}}^\dagger + i\sqrt{\frac{2}{E_{\vec{k}}}}\hat{P}_{\vec{k}}) (\sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}} - i\sqrt{\frac{2}{E_{\vec{k}}}}\hat{P}_{\vec{k}}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(E_{\vec{k}}^2 |\hat{Q}_{\vec{k}}|^2 + |\hat{P}_{\vec{k}}|^2 + iE_{\vec{k}}\hat{P}_{\vec{k}}\hat{Q}_{\vec{k}} - iE_{\vec{k}}\hat{Q}_{\vec{k}}^\dagger\hat{P}_{\vec{k}}^\dagger \right),\end{aligned}\quad (3.22)$$

De twee laatste termen kunnen we nog herschrijven door in het tweede deel een substitutie $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ te doen:

$$\frac{1}{2}i \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} (\hat{P}_{\vec{k}}\hat{Q}_{\vec{k}} - \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{P}_{\vec{k}}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} \quad (3.23)$$

Voor de volledige Hamiltoniaan vinden we dan:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= E_{GPB} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} + U_I N_0 + \frac{p_0^2}{2m_I} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[(E_{\vec{k}}^2 + 2N_0 U E_{\vec{k}}) |\hat{Q}_{\vec{k}}|^2 + |\hat{P}_{\vec{k}}|^2 + 2\sqrt{N_0} U_I \sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \hat{r}) \right].\end{aligned}\quad (3.24)$$

Dit is de vergelijking van een verplaatste harmonische oscillator, maar met een nieuw energiespectrum, dit is het Bogoliubov spectrum:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + 2N_0 U(\vec{k}) E_{\vec{k}}}. \quad (3.25)$$

Als we hierin de kinetische energie van de bosonen invullen (we stellen $\tilde{\mu} = 0$):

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_B}, \quad (3.26)$$

en de uitdrukking uit hoofdstuk 2 voor de interactie amplitude:

$$U_{\vec{k}} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B V}, \quad (3.27)$$

dan vinden we voor het Bogoliubov spectrum:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\vec{k}} &= \sqrt{\frac{\hbar^4 k^4}{4m_B^2} + 2N_0 \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B V} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_B}} \\ &= \frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + 16 \frac{N_0}{V} \pi a_{BB}} \\ &= \frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

In de laatste stap hebben we gebruik gemaakt van de definitie van de coherentie lengte:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi n a_{BB}}}, \quad (3.29)$$

met n de deeltjesdichtheid van de gecondenseerde bosonen: $n = N_0/V$. De coherentie lengte is een typische lengte schaal in een Bose-Einstein condensaat waarover veranderingen zich kunnen voordoen. Alles samen levert dit voor de Hamiltoniaan:

$$\begin{aligned} \hat{H} = E_{GPB} &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} E_{\vec{k}} + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + U_I(0)N_0 \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} [\epsilon_{\vec{k}}^2 |\hat{Q}_{\vec{k}}|^2 + |\hat{P}_{\vec{k}}|^2 + 2\sqrt{N_0} U_I \sqrt{2E_{\vec{k}}} \hat{Q}_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \hat{\vec{r}})]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

3.4 Generische polaron Hamiltoniaan

We kunnen de Hamiltoniaan nu terug schrijven in functie van creatie en annihilatie operatoren $\hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger$ en $\hat{\alpha}_{\vec{k}}$. Deze operatoren horen nu echter bij quasi deeltjes met een energie gegeven door het Bogoliubov spectrum, we noemen ze Bogoliubov deeltjes of Bogoliubov excitaties. Deze deeltjes hebben een bosonisch karakter. We schrijven de harmonische operatoren dan als volgt:

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\vec{k}}}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger], \\ \hat{P}_{\vec{k}} &= -i\sqrt{\frac{\epsilon_{\vec{k}}}{2}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger - \hat{\alpha}_{-\vec{k}}]. \end{aligned} \quad (3.31)$$

De Hamiltoniaan wordt dan:

$$\hat{H} = E_{GPB} + U_I N_0 + \hat{H}_{pol}. \quad (3.32)$$

Deze Hamiltoniaan heeft de vorm van een constante plus een deel dat de vorm van de generische polaron Hamiltoniaan heeft (zie (1.3)), welke gegeven is door:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[\epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \sqrt{N_0} U_I \sqrt{\frac{E_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}}}} e^{i\vec{k} \cdot \hat{r}} (\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger) \right]. \quad (3.33)$$

Vergelijking met (1.3) leert ons dat de plaats van de fononen is ingenomen door de Bogoliubov deeltjes met het Bogoliubov spectrum (3.28), de interactie amplitude is gegeven door:

$$V_{\vec{k}} = \sqrt{N_0} U_I \sqrt{\frac{E_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}}}} = \sqrt{N_0} U_I \left(\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2} \right)^{1/4}. \quad (3.34)$$

Merk op dat we de definitie van de Gross-Pitaevski-Bogoliubov energie een beetje veranderd hebben en ook de nulpuntsenergie erbij hebben genomen:

$$E_{GPB} = E_0 N_0 + \frac{1}{2} U N_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} N_0 U + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} (E_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}}). \quad (3.35)$$

Aangezien we enkel geïnteresseerd zijn in het generisch polaron zullen we meestal enkel werken met \hat{H}_{pol} , de rest is toch slechts een constante en zal dus geen invloed hebben. Merk echter op dat de interactie amplitude $V_{\vec{k}}$ voor grote \vec{k} naar een constante gaat, dit zal soms aanleiding geven tot divergerende integralen. Het zal blijken dat we dan de term $U_I N_0$ terug in rekening moeten brengen. Herinner dat er in de uitdrukking voor de interactie amplitude tot tweede orde ook een divergerende integraal voorkomt (zie 2.29), deze divergenties zullen elkaar opheffen.

4 Sterke koppeling: variationele methode

In dit hoofdstuk bekijken we de sterke koppeling van het systeem, we volgen hier de Landau-Peker aanpak met een variationele Gauss golf functie^{4.1}. Uit deze aanpak zal blijken dat de energie een kwadratisch dalende afhankelijkheid heeft van de koppelingsparameter α . Daarna bekijken we nog de grootte van het polaron en enkele andere mogelijkheden voor de variationele golf functie.

4.1 Hamiltoniaan en product ansatz

In hoofdstuk 3 toonden we aan dat de Hamiltoniaan kan geschreven worden als een constante plus een deel in de vorm van de generische polaron Hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger], \quad (4.1)$$

met het Bogoliubov spectrum:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}, \quad (4.2)$$

en als interactie amplitude:

$$V_{\vec{k}} = \sqrt{N_0} U_I \left(\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2} \right)^{1/4}. \quad (4.3)$$

Voor sterke koppeling gebruiken we de product ansatz, deze houdt in dat we de golf functie van het systeem kunnen schrijven als een product van de golf functie van de onzuiverheid $|\psi_I\rangle$ en het bosonische gedeelte $|\phi\rangle$. Voor de onzuiverheid gebruiken we een genormeerde Gaussische golf functie:

$$\psi_I(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4} \lambda^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2\lambda^2}\right). \quad (4.4)$$

Hierin is λ de variationele parameter, welke fysisch overeen komt met de grootte van het polaron.

^{4.1}L.D. Landau and S.I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **16**, 341 (1946).

4.2 Uitdrukking voor de energie

Als we nu de verwachtingswaarde nemen van de Hamiltoniaan ten opzichte van de golffunctie van de onzuiverheid houden we een Hamiltoniaan over die enkel werkt op het bosonische gedeelte, dit geeft:

$$\begin{aligned} \langle \psi_I | \hat{H}_{pol} | \psi_I \rangle &= \langle \psi_I | \frac{\hat{p}^2}{2m_I} | \psi_I \rangle + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} \\ &+ \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} \langle \psi_I | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \psi_I \rangle [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

De kinetische energie en de Fourier getransformeerde van de dichtheid van de golffunctie zijn gegeven door:

$$\langle \psi_I | \frac{\hat{p}^2}{2m_I} | \psi_I \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2}, \quad (4.6)$$

$$\langle \psi_I | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) | \psi_I \rangle = \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right). \quad (4.7)$$

Als we dit invullen vinden we voor de Hamiltoniaan:

$$\langle \psi_I | \hat{H}_{pol} | \psi_I \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right) [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]. \quad (4.8)$$

In deze vorm is de werking van deze Hamiltoniaan op de ongekende bosonische golffunctie moeilijk in te zien. Om de Hamiltoniaan in een duidelijkere vorm te krijgen vervolledigen we het kwadraat van de bosonische operatoren:

$$\begin{aligned} &\epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right) [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger] \\ &= \epsilon_{\vec{k}} \left(\hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger + \frac{V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right)}{\epsilon_{\vec{k}}} \right) \left(\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \frac{V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right)}{\epsilon_{\vec{k}}} \right) - \frac{V_{\vec{k}}^2 \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2}\right)}{\epsilon_{\vec{k}}}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Als we nu nog de zogenaamde verplaatste operatoren invoeren, gedefinieerd als:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_{\vec{k}} &= \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \frac{V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right)}{\epsilon_{\vec{k}}}; \\ \hat{\beta}_{\vec{k}}^\dagger &= \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger + \frac{V_{\vec{k}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{4}\right)}{\epsilon_{\vec{k}}}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

dan vinden we voor de Hamiltoniaan:

$$\langle \psi_I | \hat{H}_{pol} | \psi_I \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{V_{\vec{k}}^2 \exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{2})}{\epsilon_{\vec{k}}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\beta}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\vec{k}}. \quad (4.11)$$

Als we nu nog de verwachtingswaarde nemen ten opzichte van de ongekende bosonische golffunctie $|\phi\rangle$ vinden we de energie:

$$E_\phi(\lambda) = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{V_{\vec{k}}^2 \exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{2})}{\epsilon_{\vec{k}}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \langle \phi | \hat{\beta}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\vec{k}} | \phi \rangle, \quad (4.12)$$

deze is nog afhankelijk van de bosonische golffunctie $|\phi\rangle$ en van de variationele parameter λ .

4.3 Grondtoestandsenergie

Om de grondtoestandsenergie te vinden komt het erop aan om uitdrukking (4.12) te minimaliseren. Een probleem is dat de energie nog afhankelijk is van de bosonische golffunctie, welke we niet kennen. Het is echter duidelijk dat de energie minimaal zal zijn als de bosonische golffunctie overeen komt met het vacuüm voor de $\hat{\beta}_{\vec{k}}$ -operator, de bosonische golffunctie zal dan voldoen aan $\langle \phi | \hat{\beta}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\vec{k}} | \phi \rangle = 0$. We hebben dan volgende uitdrukking voor de energie:

$$E_0(\lambda) = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{V_{\vec{k}}^2 \exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{2})}{\epsilon_{\vec{k}}}, \quad (4.13)$$

Als we hierin nog de uitdrukkingen (4.3) en (5.4) invullen voor de interactie amplitude en de dispersie vinden we:

$$E_0(\lambda) = \frac{3\hbar^2}{4m_I \lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{N_0 U_I^2 \sqrt{\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2}} \exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{2})}{\frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}}. \quad (4.14)$$

Nu gebruiken we nog uitdrukking (2.30) uit hoofdstuk 2 voor U_I^2 :

$$U_I^2 = \left(\frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{m_r V} \right)^2, \quad (4.15)$$

dit geeft:

$$\begin{aligned}
E_0(\lambda) &= \frac{3\hbar^2}{4m_I\lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{N_0 \left(\frac{2\pi\hbar^2 a_{IB}}{m_r V} \right)^2 \sqrt{\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2}\right)}{\frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}} \\
&= \frac{3\hbar^2}{4m_I\lambda^2} - (2\pi)^2 N_0 \frac{2m_B \xi^2 a_{IB}^2 \hbar^2}{m_r^2 V^2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{\exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2}\right)}{(\xi k)^2 + 2}. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

We kunnen nu nog de som omzetten in een integraal en de definitie van de coherentielengte (3.29) gebruiken om N_0/V te schrijven als $N_0/V = 1/(8\pi a_{BB}\xi^2)$, we vinden dan:

$$E_0(\lambda) = \frac{3\hbar^2}{4m_I\lambda^2} - \pi \frac{m_B a_{IB}^2 \hbar^2}{m_r^2 a_{BB} V} \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{k^2}{(\xi k)^2 + 2} \exp\left(-\frac{\lambda^2 k^2}{2}\right). \quad (4.17)$$

Om deze uitdrukking een beetje te vereenvoudigen gaan we over naar dimensieloze eenheden, hiervoor gebruiken we dat ξ een natuurlijke lengte eenheid is voor Bose-Einstein condensaten. We gaan dan over naar de dimensieloze variabelen als volgt: $\tilde{k} = \xi k$ en $\tilde{\lambda} = \lambda/\xi$. Als we dan ook nog als energie eenheid $\epsilon_0 = \hbar^2/(m_I \xi^2)$ invoeren vinden we voor de energie:

$$\frac{E_0(\lambda)}{\epsilon_0} = \frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} - \frac{a_{IB}^2}{a_{BB}\xi} \frac{m_B m_I}{m_r^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{k}^2 + 2} \exp\left(-\frac{\tilde{\lambda}^2 \tilde{k}^2}{2}\right). \quad (4.18)$$

Hieruit blijkt dat de koppelingssterkte afhankelijk is van de parameter

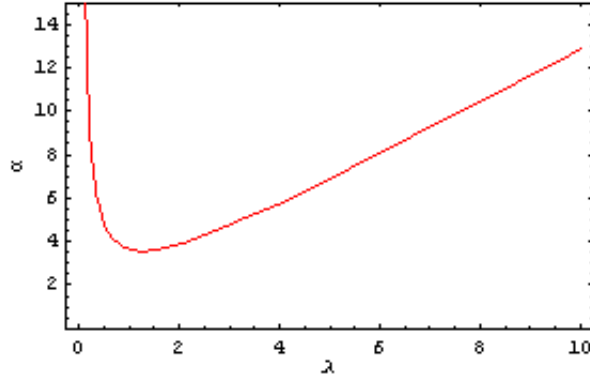
$$\alpha = \frac{a_{IB}^2}{a_{BB}\xi}, \quad (4.19)$$

welke we de koppelingsparameter noemen, en een massa factor. Deze kan in rekening worden gebracht, maar in deze thesis worden de massa's van de onzuiverheid en van de bosonen gelijk verondersteld. De enige reden dat we dit doen is om de vergelijkingen iets overzichtelijker te houden, er treden geen extra complicaties op voor verschillende massa's. De massa factor is dan gelijk aan 4 en we vinden voor de energie:

$$\frac{E_0(\lambda)}{\epsilon_0} = \frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{k}^2 + 2} \exp\left(-\frac{\tilde{\lambda}^2 \tilde{k}^2}{2}\right). \quad (4.20)$$

De integraal kan analytisch worden uitgewerkt:

$$\int_0^\infty d\tilde{k} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{k}^2 + 2} \exp\left(-\frac{\tilde{\lambda}^2 \tilde{k}^2}{2}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}} - \frac{\pi}{\sqrt{2}} e^{\tilde{\lambda}^2} \operatorname{erfc}(\tilde{\lambda}), \quad (4.21)$$



Figuur 4.1: De figuur geeft α in functie van $\tilde{\lambda}$, het is duidelijk dat er een ondergrens voor α bestaat.

waar $\text{erfc}(x)$ de complementaire error functie is. We willen nu bepalen voor welke $\tilde{\lambda}$ de energie een minimum bereikt, deze vinden we door de afgeleide van de energie gelijk aan 0 te stellen:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial E_0(\tilde{\lambda})}{\partial \tilde{\lambda}} \epsilon_0 \\
\Leftrightarrow 0 &= -\frac{3}{2\tilde{\lambda}^3} - \frac{2\alpha}{\pi} \left[-\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}^2} - \frac{2\pi\tilde{\lambda}}{\sqrt{2}} e^{\tilde{\lambda}^2} \text{erfc}(\tilde{\lambda}) + \frac{\pi}{\sqrt{2}} e^{\tilde{\lambda}^2} \frac{2e^{-\tilde{\lambda}^2}}{\sqrt{\pi}} \right] \\
\Leftrightarrow 0 &= -\frac{3}{2\tilde{\lambda}^3} + \frac{2\alpha}{\pi} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}^2} + \sqrt{2\pi}\tilde{\lambda}e^{\tilde{\lambda}^2} \text{erfc}(\tilde{\lambda}) - \sqrt{2\pi} \right] \quad (4.22)
\end{aligned}$$

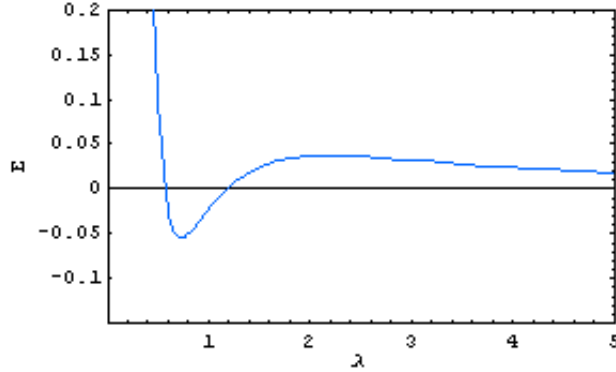
Deze vergelijking kan numeriek opgelost worden voor een willekeurige α , het is echter eenvoudiger om α te schrijven als functie van $\tilde{\lambda}$:

$$\alpha(\tilde{\lambda}) = \frac{3\pi}{4\tilde{\lambda}^3 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}^2} + \sqrt{2\pi}\tilde{\lambda}e^{\tilde{\lambda}^2} \text{erfc}(\tilde{\lambda}) - \sqrt{2\pi} \right)}, \quad (4.23)$$

dit is weergegeven in figuur 4.1. Het blijkt dat er een ondergrens is voor α bij $\alpha = 3.56641\dots$, voor lagere waardes is er geen minimum in de energie. Dit geeft aan dat de gebruikte product ansatz enkel voor sterke koppeling van toepassing is. Uit de figuur blijkt ook dat er voor elke α twee mogelijkheden zijn voor $\tilde{\lambda}$, als we echter de energie bekijken in functie van $\tilde{\lambda}$ (zie figuur 4.2) zien we dat enkel de laagste waarde van $\tilde{\lambda}$ met een minimum overeen stemt.

4.4 Reeksontwikkeling voor de energie

In deze sectie benaderen we de energie met een reeks, wat iets bruikbaar is en waardoor we ook beter weten wat voor verloop de energie volgt als



Figuur 4.2: Uit deze figuur is duidelijk dat de kleinste oplossing voor $\tilde{\lambda}$ met een minimum in de energie overeenstemt.

functie van de koppelingsparameter. Uit figuur 4.1 blijkt dat voor grote α de variationele parameter naar nul zal gaan, we kunnen dan de uitdrukking voor α expanderen voor kleine $\tilde{\lambda}$:

$$\alpha = \frac{3}{2\tilde{\lambda}}\sqrt{\frac{\pi}{2}} + 3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\tilde{\lambda} - \frac{3\pi}{2}\tilde{\lambda}^2 + 6\sqrt{2\pi}\tilde{\lambda}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^4). \quad (4.24)$$

Als we enkel de laagste orde bijhouden kunnen we deze vergelijking inverteren tot:

$$\tilde{\lambda} = \frac{3}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2}}. \quad (4.25)$$

In figuur 4.3 is $\tilde{\lambda}$ weergegeven in functie van α . Het is duidelijk dat dit voor grote α een goede benadering is. Als we de termen tot tweede laagste orde bijhouden in (4.24) vinden we dat we $\tilde{\lambda}$ kunnen schrijven als (enkel de laagste oplossing voor $\tilde{\lambda}$ werd bijgehouden):

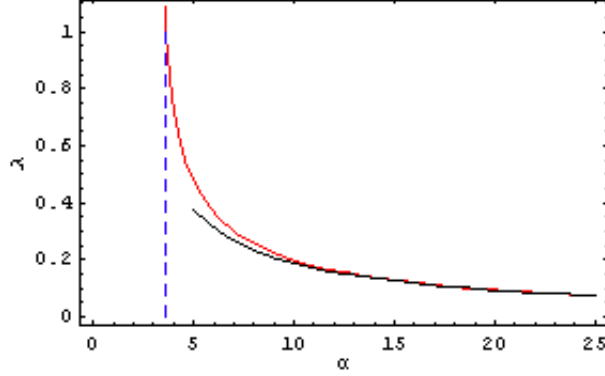
$$\tilde{\lambda} = \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 - 9\pi}}{3\sqrt{2\pi}}, \quad (4.26)$$

we kunnen dit nog expanderen voor grote α , dit geeft:

$$\tilde{\lambda} = \frac{3}{2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2}} - \frac{27\pi^{3/2}}{8\sqrt{2}}\frac{1}{\alpha^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\alpha^4}\right). \quad (4.27)$$

Voor de energie hebben we de uitdrukking (4.20):

$$\frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} = \frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} - \frac{2\alpha}{\pi} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{\tilde{\lambda}} - \frac{\pi}{\sqrt{2}}e^{\tilde{\lambda}^2}\text{erfc}(\tilde{\lambda}) \right), \quad (4.28)$$



Figuur 4.3: In deze figuur is de variationele parameter $\tilde{\lambda}$ weergegeven als functie van de koppelingsparameter. De blauwe stippellijn geeft de ondergrens voor α aan, de rode curve is de exacte oplossing en de zwarte kromme geeft de benaderende uitdrukking (4.25).

voor kleine $\tilde{\lambda}$ kunnen we deze expanderen als:

$$\frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} = \frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} - \frac{2\alpha}{\pi} \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}} - \frac{\pi}{\sqrt{2}} + \sqrt{2\pi}\tilde{\lambda} - \frac{\pi}{\sqrt{2}}\tilde{\lambda}^2 + \frac{2\sqrt{2\pi}}{3}\tilde{\lambda}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^4) \right). \quad (4.29)$$

Als we hierin nog de expansie voor α invullen, krijgen we een reeksontwikkeling voor de energie in functie van $\tilde{\lambda}$:

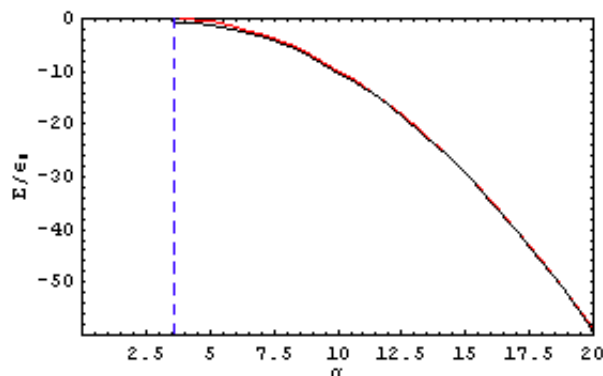
$$\begin{aligned} \frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} &= \frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} - \frac{2}{\pi} \left(\frac{3}{2\tilde{\lambda}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} + 3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\tilde{\lambda} - \frac{3\pi}{2}\tilde{\lambda}^2 + 6\sqrt{2\pi}\tilde{\lambda}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^4) \right) \\ &\quad \times \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\tilde{\lambda}} - \frac{\pi}{\sqrt{2}} + \sqrt{2\pi}\tilde{\lambda} - \frac{\pi}{\sqrt{2}}\tilde{\lambda}^2 + \frac{2\sqrt{2\pi}}{3}\tilde{\lambda}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}^4) \right). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Dit geeft:

$$\frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} = -\frac{3}{4\tilde{\lambda}^2} + \frac{3\sqrt{2}}{2\tilde{\lambda}} - 6 + \mathcal{O}(\tilde{\lambda}), \quad (4.31)$$

tot laagste orde vinden we dus voor de energie (we vullen (4.25) in):

$$\frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} = -\frac{2}{3\pi}\alpha^2. \quad (4.32)$$



Figuur 4.4: In deze figuur is de energie in functie van de koppelpingsparameter weergegeven. De blauwe stippellijn geeft de ondergrens voor α aan, de rode curve is de exacte oplossing en de zwarte kromme geeft de benaderende uitdrukking (4.33).

Tot tweede laagste orde vinden we (we houden de eerste twee termen van (4.31) bij en vullen (4.27) in):

$$\frac{E_0(x_0)}{\epsilon_0} = -\frac{2}{3\pi}\alpha^2 + \sqrt{2}\alpha - 3 + O\left(\frac{1}{\alpha}\right). \quad (4.33)$$

In figuur 4.4 is de energie samen met de benadering (4.33) afgebeeldt als functie van α , het blijkt dat de reeksontwikkeling voor grote α een goede benadering is. We besluiten dus dat de energie van het polaron een kwadratisch dalende afhankelijkheid heeft van de koppelpingsparameter, deze eigenschap vinden we ook terug bij een polaron in een halfgeleider of een polair kristal bij sterke koppeling.

4.5 De grootte van het polaron

Aangezien men bij een experiment zelden met 1 atoom kan werken is het belangrijk om te weten hoeveel onzuiverheden er maximaal aanwezig mogen zijn opdat men de hierboven beschreven één polaron theorie nog kan gebruiken. Om te beginnen is het belangrijk om de onzuiverheid-onzuiverheid verstrooiingslengte a_{II} zo klein mogelijk te houden: $n_I a_{II}^3 \ll 1$, zodat de interacties tussen de onzuiverheden kunnen verwaarloosd worden. Een tweede criterium is dat de afstand tussen de onzuiverheden groter moet zijn dan de straal van het polaron, want als de wolk Bogoliubov excitaties rond de onzuiverheden mekaar overlappen zal de één deeltjesbeschrijving niet meer opgaan.

Een eerste afchatting voor de grootte van het polaron is λ , deze is maximaal ongeveer gelijk aan de coherentielengte ξ en zal kleiner worden voor sterkere koppeling (zie figuur 4.1). Een betere waarde voor de grootte is de dichtheid aan Bogoliubov excitaties $\rho_B(\vec{r})$ in de wolk rond de onzuiverheid. De aanwezigheid van deze excitaties zijn het gevolg van dat we niet met het vacuüm voor de Bogoliubov excitaties hebben gewerkt, maar met het vacuüm voor de verplaatste operator $\beta_{\vec{k}}$. Dit zal ongeveer overeen komen met het dichtheidsprofiel van de atomen, welk men ook kan meten. De Fourier getransformeerde van deze dichtheid is gegeven door:

$$\hat{\rho}(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}. \quad (4.34)$$

Als we de uniforme achtergrond buiten beschouwing laten (welke overeen komt met $\vec{q} = 0$) en de Bogoliubov benadering gebruiken (zie sectie 3.2), vinden we:

$$\hat{\rho}(\vec{q} \neq 0) = \sqrt{N_0}(\hat{c}_{-\vec{q}}^\dagger + \hat{c}_{\vec{q}}). \quad (4.35)$$

Om dit te berekenen schrijven we de creatie en annihilatie operatoren in functie van de verplaatste operatoren:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\vec{k}} &= \frac{1}{2}(\sqrt{2E_{\vec{k}}}\hat{Q}_{\vec{k}} - i\sqrt{\frac{2}{E_{\vec{k}}}}\hat{P}_{\vec{k}}^\dagger) \\ &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{E_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}}}}[\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger] + \sqrt{\frac{\epsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}}[\hat{\alpha}_{\vec{k}} - \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{E_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}}}}[\hat{\beta}_{\vec{k}} + \hat{\beta}_{-\vec{k}}^\dagger - 2\frac{V_{\vec{k}}\exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{4})}{\epsilon_{\vec{k}}}] + \sqrt{\frac{\epsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}}[\hat{\beta}_{\vec{k}} - \hat{\beta}_{-\vec{k}}^\dagger]\right), \end{aligned} \quad (4.36)$$

met een analoge vergelijking voor de complex toegevoegde. De reden dat we de dichtheidsoperator in functie van de verplaatste operatoren hebben geschreven is dat we de werking van deze operatoren op het nieuwe vacuüm kennen. De verwachtingswaarde van één van deze operatoren voor dit vacuüm is immers nul. We vinden dan volgende uitdrukking voor de verwachtingswaarde van de dichtheid ten opzichte van het $\hat{\beta}_{\vec{k}}$ vacuüm:

$$\rho(\vec{q} \neq 0) = \langle \phi | \hat{\rho}(\vec{q} \neq 0) | \phi \rangle = -2\sqrt{N_0} \frac{V_{\vec{k}} \exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{4})}{\epsilon_{\vec{k}}}. \quad (4.37)$$

Als we de interactie amplitude en het Bogoliubov spectrum invullen wordt de voorfactor:

$$\begin{aligned}
2\sqrt{N_0}\frac{V_{\vec{k}}}{\epsilon_{\vec{k}}} &= 2\sqrt{N_0}\frac{\sqrt{N_0}U_I\left(\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2+2}\right)^{1/4}}{\frac{\hbar^2 k}{2m_B}\sqrt{k^2+\frac{2}{\xi^2}}} \\
&= 2N_0\frac{2\pi\hbar^2 a_{IB}}{m_r V}\frac{2m_B\xi^2(\xi k)^{1/2}}{\hbar^2\xi k((\xi k)^2+2)^{3/4}} \\
&= 8\pi\frac{1}{\xi^2 8\pi a_{BB}}a_{IB}\frac{m_B}{m_r}\frac{\xi^2}{(\xi k)^{1/2}((\xi k)^2+2)^{3/4}} \\
&= \frac{a_{IB}}{a_{BB}}\frac{m_B}{m_r}\frac{1}{(\xi k)^{1/2}((\xi k)^2+2)^{3/4}}. \tag{4.38}
\end{aligned}$$

Als we nu nog de twee massa's gelijk stellen, krijgen we nog een factor 2 van de massa term. Nu doen we een Fourier transformatie van de dichtheid, zodat we een uitdrukking krijgen in de reële ruimte:

$$\rho(\vec{r}) = N_0 - 2\frac{a_{IB}}{a_{BB}}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{\exp(-\frac{\lambda^2 k^2}{4})}{(\xi k)^{1/2}((\xi k)^2+2)^{3/4}}\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}), \tag{4.39}$$

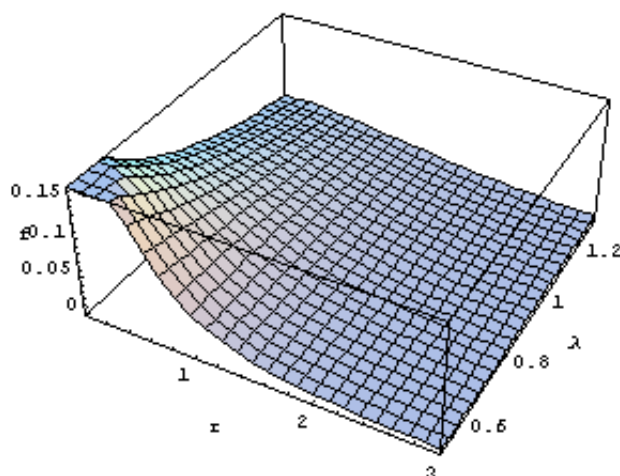
waar we de uniforme achtergrond $\rho(\vec{q}=0) \approx N_0$ terug in rekening hebben gebracht. We werken de integraal verder uit door gebruik te maken van bolcoördinaten en over te gaan op de dimensieloze variabelen $\tilde{k} = \xi k$, $\tilde{r} = r/\xi$ en $\tilde{\lambda} = \lambda/\xi$:

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{r}) &= N_0 - 2\frac{a_{IB}}{a_{BB}\xi^3}\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty d\tilde{k}\int_{-1}^1 d\cos\theta\frac{\tilde{k}^{3/2}\exp(-\frac{\tilde{\lambda}^2\tilde{k}^2}{4})}{(\tilde{k}^2+2)^{3/4}}\exp(i\tilde{k}\tilde{r}\cos\theta) \\
&= N_0 - \frac{a_{IB}}{a_{BB}\xi^3}\frac{1}{\pi^2\tilde{r}}\int_0^\infty d\tilde{k}\frac{\tilde{k}^{1/2}\exp(-\frac{\tilde{\lambda}^2\tilde{k}^2}{4})}{(\tilde{k}^2+2)^{3/4}}\sin(\tilde{k}\tilde{r}). \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Voor de overblijvende \tilde{k} -integraal is er geen eenvoudige analytische oplossing. Om een idee te krijgen van de vorm en uitgebreidheid van de dichtheid plotten we in figuur 4.5 de functie

$$f(\tilde{r}, \tilde{\lambda}) = \int_0^\infty \frac{d\tilde{k}}{\tilde{r}\pi^2}\frac{\tilde{k}^{1/2}\exp(-\frac{\tilde{\lambda}^2\tilde{k}^2}{4})}{(\tilde{k}^2+2)^{3/4}}\sin(\tilde{k}\tilde{r}). \tag{4.41}$$

In de figuur hebben we de functie geplot tot aan de maximum waarde 1.267 van $\tilde{\lambda}$, welke overeen komt met de kleinste waarde voor α waar de sterke

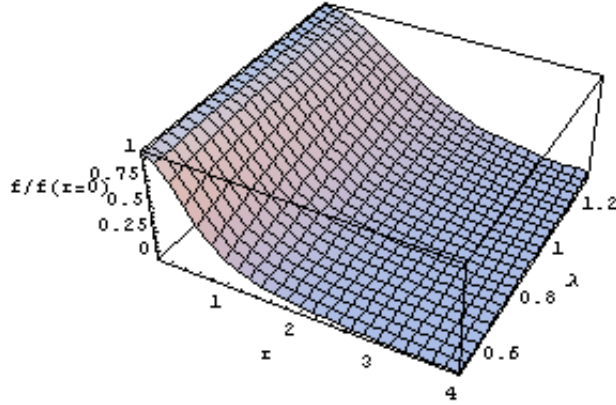


Figuur 4.5: De functie $f(\tilde{r}, \tilde{\lambda})$ geeft een idee van de verandering van het dichtheidsprofiel van het condensaat tengevolge van de onzuiverheid.

koppeling een resultaat geeft. Het is duidelijk dat de vervorming van de dichtheid scherper wordt naarmate $\tilde{\lambda}$ kleiner wordt, wat overeen komt met een grotere α . In figuur 4.6 plotten we $f(\tilde{r}, \tilde{\lambda})/f(0, \tilde{\lambda})$, zodat de functie genormaliseerd is tot zijn maximale waarde. Deze figuur geeft een beter idee van de uitgebreidheid van de vervorming van de dichtheid, welke van de orde van de coherentielengte blijkt te zijn. We besluiten dat voor sterke koppeling de grootte van het polaron in een condensaat van de orde van de coherentielengte is en dat het polaron meer gelokaliseerd zal zijn voor sterkere koppeling (grotere α).

4.6 Andere golffuncties voor de onzuiverheid

In de beschrijving van de sterke koppeling gingen we er tot nu toe van uit dat een Gauss curve een goede benadering is voor de golffunctie van de onzuiverheid. Dit deden we omdat deze voor het elektronisch polaron reeds goede resultaten opleverde. In deze sectie bekijken we enkele andere mogelijkheden voor de gelokaliseerde golffunctie, namelijk een exponentiële en een Cauchy curve, en kijken dan of de energie die deze opleveren kleiner of groter zijn dan deze voor de Gauss curve. De variationele methode levert immers een bovengrens voor de energie en als we dus een kleinere energie vinden, betekent dit dat we een betere benadering hebben voor de golffunctie.



Figuur 4.6: Hier plotten we de functie $f(\vec{r}, \tilde{\lambda})$, genormaliseerd tot zijn maximale waarde. Dit geeft een beter idee van de uitgebreidheid van de vervorming van het condensaat ten gevolge van de onzuiverheid, welke van de orde van de coherentielengte blijkt te zijn.

De genormaliseerde exponentiële golffunctie is:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\lambda^3}} \exp(-\lambda r) \quad (4.42)$$

Deze geeft voor de kinetische energie en de dichtheid:

$$\langle \phi | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \phi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} \quad (4.43)$$

$$\langle \phi | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) | \phi \rangle = \frac{16}{(4 + k^2\lambda^2)^2} \quad (4.44)$$

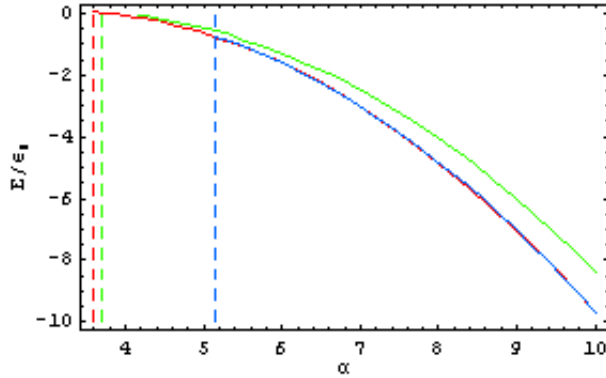
We kunnen de uitwerking voor de Gauss curve gewoon overnemen, we vinden dan de volgende uitdrukking voor de grondtoestandsenergie:

$$E_0(\lambda) = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} - \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{V_{\vec{k}}^2}{\epsilon_{\vec{k}}} \left(\frac{16}{(4 + k^2\lambda^2)^2} \right)^2. \quad (4.45)$$

Als we dit verder uitwerken vinden we:

$$\frac{E(\lambda)}{\epsilon_0} = \frac{1}{2\lambda^2} - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \frac{k^2}{k^2 + 2} \left(\frac{16}{(4 + k^2\lambda^2)^2} \right)^2 \quad (4.46)$$

Het blijkt dat er voor een exponentiële golffunctie een oplossing is vanaf $\alpha = 3.69724$. We doen nu hetzelfde voor een genormaliseerde Cauchy curve,



Figuur 4.7: De energie in functie van de koppingsparameter α voor verschillende keuzes voor de golffunctie van de onzuiverheid: Gauss (rood), exponentiële (groen) en Cauchy (blauw).

de golffunctie van de onzuiverheid is dan:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{\lambda}}{\lambda^2 + r^2} \quad (4.47)$$

Dit geeft voor de kinetische energie en de dichtheid:

$$\langle \phi | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \phi \rangle = \frac{\hbar^2}{4m\lambda^2} \quad (4.48)$$

$$\langle \phi | \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) | \phi \rangle = \exp(-\lambda k) \quad (4.49)$$

De energie is dan:

$$\frac{E(\lambda)}{\epsilon_0} = \frac{1}{4\lambda^2} - \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^\infty \frac{k^2}{k^2 + 2} \exp(-2\lambda k) \quad (4.50)$$

Hier hebben we een oplossing vanaf $\alpha = 5.13642$.

In figuur 4.7 zijn de energieën van het systeem voor de verschillende keuzes weergegeven. Het is duidelijk dat de Gaussische curve de beste keuze is. Voor de exponentiële functie is de energie hoger en dit is dus duidelijk een slechtere keuze. Voor de Cauchy curve zijn de energieën ongeveer hetzelfde, maar de beschrijving is slechts goed voor $\alpha > 5.13642$, terwijl dit voor de Gauss curve $\alpha > 3.56641$ was.

5 Zwakke koppeling: tijdsafhankelijke perturbatietheorie

In dit hoofdstuk wordt de methode van de tijdsafhankelijke perturbatietheorie gebruikt om de energie te berekenen bij kleine koppeling. Het zal blijken dat we de renormalisering term $N_0 U_I$ zullen moeten uitschrijven tot tweede orde in de Lippmann-Schwinger vergelijking om een convergerende energie te krijgen, we vinden uiteindelijk dat de energie een lineair stijgende afhankelijkheid van de koppelingsparameter α zal hebben. We berekenen ook een uitdrukking voor de effectieve massa van het polaron en kijken uiteindelijk ook wat er gebeurt met de energie en de levensduur van het polaron als de onzuiverheid een impuls heeft.

5.1 Uitdrukking voor de energie

Zoals we in hoofdstuk 3 hebben aangetoond kunnen we de Hamiltoniaan van het systeem schrijven als:

$$\hat{H} = E_{GPB} + U_I N_0 + \hat{H}_{pol}, \quad (5.1)$$

met \hat{H}_{pol} de generische polaron Hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} (\epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \hat{r}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]). \quad (5.2)$$

We zagen ook dat de interactie amplitude gegeven is door:

$$V_{\vec{k}} = \sqrt{N_0} U_I \left(\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2} \right)^{1/4}, \quad (5.3)$$

en dat de dispersie van de bosonen het Bogoliubov spectrum is:

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k}{2m_B} \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}}. \quad (5.4)$$

In het volgende zullen we de constante E_{GPB} buiten beschouwing laten en enkel met \hat{H}_{pol} werken. We maken gebruik van perturbatietheorie om de energie te berekenen, met \hat{H}_0 de ongestoorde Hamiltoniaan van de onzuiverheid en de Bogoliubov deeltjes zonder interactie:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}}, \quad (5.5)$$

en \hat{H}_1 de interactiehamiltoniaan:

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]. \quad (5.6)$$

In de ongestoorde toestand is de onzuiverheid een vrij deeltje met golfvector \vec{q} , de golffunctie is dan een vlakke golf:

$$\langle \vec{r} | \psi_{\vec{q}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}). \quad (5.7)$$

Voor het condensaat gebruiken we voor de ongestoorde toestanden de bezettingsrepresentatie voor de Bogoliubov excitaties, $|\dots n_{\vec{k}} \dots \rangle$, met $\hat{n}_{\vec{k}} = \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}}$ de teloperator die het aantal Bogoliubov excitaties met golfvector \vec{k} telt. De energie van de ongestoorde toestand is dus:

$$E^{(0)} = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k}}. \quad (5.8)$$

Bij voldoende lage temperatuur zullen er geen Bogoliubov deeltjes geëxciteerd zijn en is de ongestoorde toestand van het condensaat dus het Bogoliubov vacuüm, waarbij alle $n_{\vec{k}}$ gelijk aan nul zijn.

De eerste orde correctie op de energie is gegeven door:

$$E^{(1)} = \langle \Psi^0 | \hat{H}_1 | \Psi^0 \rangle, \quad (5.9)$$

deze zal nul zijn, omdat de interactiehamiltoniaan steeds 1 creatie of annihilatie operator bevat en de verwachtingswaarde hiervan tussen het Bogoliubov vacuüm nul geeft. De tweede orde correctie op de grondtoestand is gegeven door:

$$E^{(2)} = \sum_{|\Psi^* \rangle} \frac{|\langle \Psi^0 | \hat{H}_1 | \Psi^* \rangle|^2}{E^{(0)} - E^*}, \quad (5.10)$$

met $|\Psi^* \rangle$ en E^* de geëxciteerde toestanden en hun energie. De enige mogelijke geëxciteerde toestanden waarvoor het matrix element niet 0 is bestaan uit de onzuiverheid met een willekeurige golfvector \vec{Q} en het condensaat met 1 geëxciteerd deeltje. Als we dit invullen vinden we:

$$E^{(2)} = \sum_{\vec{Q}, \vec{K}} \frac{|\langle \psi_{\vec{q}} | \langle 00 \dots | \hat{H}_1 | 0 \dots 0 (n_{\vec{K}} = 1) 0 \dots \rangle | \psi_{\vec{Q}} \rangle|^2}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_I} - \epsilon_{\vec{K}}}. \quad (5.11)$$

Nu kunnen we makkelijk het matrixelement uitrekenen, dit geeft:

$$\begin{aligned} \langle 00\dots|\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger|0\dots0(n_{\vec{K}} = 1)0\dots\rangle &= \delta(\vec{k} - \vec{K}); \\ \langle \psi_{\vec{q}}|e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}|\psi_{\vec{Q}}\rangle &= \delta(\vec{q} - \vec{k} - \vec{Q}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Als we deze invullen in de uitdrukking voor de energie van een onzuiverheid met golfvector \vec{q} vinden we:

$$E^{(2)} = \sum_{\vec{K}} \frac{|V_{\vec{K}}|^2}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2(\vec{q}-\vec{K})^2}{2m_I} - \epsilon_{\vec{K}}} \quad (5.13)$$

$$= N_0 U_I^2 \sum_{\vec{K}} \frac{\sqrt{\frac{\xi^2 K^2}{1+\xi^2 K^2}}}{\frac{\hbar^2 \vec{q}\cdot\vec{K}}{m_I} - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2}{2m_B} K \sqrt{K^2 + \frac{2}{\xi^2}}}, \quad (5.14)$$

waar we in de tweede stap de interactie amplitude (5.3) en het Bogoliubovspectrum (5.4) hebben ingevuld. We zetten de som nu om in een integraal en gaan over op bolcoördinaten:

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= N_0 U_I^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \frac{\sqrt{\frac{\xi^2 K^2}{2+\xi^2 K^2}}}{\frac{\hbar^2 \vec{q}\cdot\vec{K}}{m_I} - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2}{2m_B} K \sqrt{K^2 + \frac{2}{\xi^2}}} \\ &= N_0 U_I^2 \frac{V}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^\infty dK K^2 \sqrt{\frac{\xi^2 K^2}{2+\xi^2 K^2}} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \frac{1}{\frac{\hbar^2 q K \cos(\theta)}{m_I} - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2}{2m_B} K \sqrt{K^2 + \frac{2}{\xi^2}}}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Nu maken we nog gebruik van de dimensieloze veranderlijken $\tilde{K} = \xi K$ en $\tilde{q} = \xi q$, hierbij gebruiken we de coherentielengte ξ , welke een typische lengte eenheid is in een Bose-Einstein condensaat. We voeren ook een energie eenheid in: $\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{m_I \xi^2}$. Als we deze substituties doen vinden we:

$$\begin{aligned} E^{(2)} &= N_0 U_I^2 \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{2}{\epsilon_0 \xi^3} \int_0^\infty d\tilde{K} \tilde{K}^2 \sqrt{\frac{\tilde{K}^2}{2+\tilde{K}^2}} \\ &\quad \times \int_{-1}^1 d(\cos(\theta)) \frac{1}{2\tilde{q}\tilde{K} \cos(\theta) - \tilde{K}^2 - \frac{m_I}{m_B} \tilde{K} \sqrt{\tilde{K}^2 + 2}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Om de uitdrukkingen iets overzichtelijker te houden stellen we vanaf nu de massa's van de onzuiverheid en de bosonen gelijk, dit is echter geen vereiste

en het enige gevolg van het algemene geval is dat de uitdrukkingen iets complexer worden, maar men kan wel dezelfde stappen volgen. De integraal over $\cos(\theta)$ geeft:

$$\begin{aligned}
I &= \frac{1}{2\tilde{q}\tilde{K}} \int_{\cos(\theta)=-1}^{\cos(\theta)=1} \frac{d(2\tilde{q}\tilde{K} \cos(\theta) - \tilde{K}^2 - \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2 + 2})}{2\tilde{q}\tilde{K} \cos(\theta) - \tilde{K}^2 - \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2 + 2}} \\
&= \frac{1}{2\tilde{q}\tilde{K}} \ln(|2\tilde{q}\tilde{K} \cos(\theta) - \tilde{K}^2 - \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2 + 2}|) \Big|_{\cos(\theta)=-1}^{\cos(\theta)=1} \\
&= \frac{1}{2\tilde{q}\tilde{K}} \left[\ln(|2\tilde{q}\tilde{K} - \tilde{K}^2 - \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2 + 2}|) - \ln(|-2\tilde{q}\tilde{K} - \tilde{K}^2 - \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2 + 2}|) \right] \\
&= \frac{1}{2\tilde{q}\tilde{K}} \left[\ln\left(|1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}|\right) - \ln\left(|1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} + \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}|\right) \right]. \quad (5.17)
\end{aligned}$$

Als we gebruik maken van de uitdrukking voor de interactie amplitude (2.30) uit hoofdstuk 2 en de definitie van de coherentie lengte: $N_0/V = 1/(\xi^2 8\pi n a_{BB})$ kunnen we de voorfactor nog herschrijven als:

$$\begin{aligned}
\frac{N_0 U_I^2 V}{\xi^3 (2\pi)^2 \epsilon_0} &= \left(\frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{V m_r} \right)^2 \frac{N_0 V}{\xi^3 (2\pi)^2 \epsilon_0} \\
&= (2\pi a_{IB})^2 \frac{N_0 \xi}{V (2\pi)^2} \left(\frac{m_I}{m_r} \right)^2 \epsilon_0 \\
&= a_{IB}^2 \frac{N_0}{V} \frac{1}{\xi 8\pi n a_{BB}} \left(\frac{m_I}{m_r} \right)^2 \epsilon_0 \\
&= \frac{a_{IB}^2}{8\pi a_{BB} \xi} \left(\frac{m_I}{m_r} \right)^2 \epsilon_0. \quad (5.18)
\end{aligned}$$

Voor gelijke massa's geeft de massa factor een 4. We voeren nu ook nog de dimensieloze koppelingsparameter α in:

$$\alpha = \frac{a_{IB}^2}{a_{BB} \xi}. \quad (5.19)$$

We vinden dan uiteindelijk voor de energie:

$$\begin{aligned}
\frac{E^{(2)}}{\epsilon_0} &= \frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{2\tilde{q}} \int_0^\infty d\tilde{K} \tilde{K}^2 \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \\
&\quad \times \left[\ln \left(\left| 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}} \right| \right) - \ln \left(\left| 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} + \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}} \right| \right) \right]. \quad (5.20)
\end{aligned}$$

In de volgende secties zal blijken dat er zich nog enkele complicaties voordoen om deze energie uit te rekenen.

5.2 Renormalisatie

Het blijkt dat de \tilde{K} -integraal divergeert. Inderdaad, als we de limiet nemen voor grote \tilde{K} , vinden we voor het integrandum:

$$\begin{aligned}
& \lim_{\tilde{K} \rightarrow \infty} \frac{\tilde{K}^2}{2\tilde{q}} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \left[\ln \left(\left| 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2} - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}} \right| \right) - \ln \left(\left| 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2} + \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}} \right| \right) \right] \\
&= \lim_{\tilde{K} \rightarrow \infty} \frac{\tilde{K}}{2\tilde{q}} \left[\ln \left(\left| 2 - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}} \right| \right) - \ln \left(\left| 2 + \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}} \right| \right) \right] \\
&= \lim_{\tilde{K} \rightarrow \infty} \frac{\tilde{K}}{2\tilde{q}} \left[\ln 2 - \frac{\tilde{q}}{\tilde{K}} - \left(\ln 2 + \frac{\tilde{q}}{\tilde{K}} \right) \right] \\
&= -1
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Nu is het belangrijk op te merken dat er we in hoofdstuk 2 hebben aangetoond dat er in de uitdrukking voor de interactie energie tot tweede orde ook nog een divergerende k -integraal voorkomt (zie 2.29). Als we terug de term $N_0 U_I$ in rekening brengen, maar nu de uitdrukking voor U_I tot tweede orde uitschrijven hebben we:

$$U_I = \frac{2\pi\hbar^2 a_{IB}}{m_r V} + U_I^2 \sum_{\vec{k}} \frac{2m_r}{(\hbar k)^2}. \tag{5.22}$$

Als we nu zoals hierboven de som vervangen door een integraal, overgaan naar bolcoördinaten, de dimensieloze variabelen invoeren en de massa's gelijk stellen vinden we:

$$U_I^2 \sum_{\vec{k}} \frac{2m_r}{(\hbar k)^2} = U_I^2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty dk k^2 \frac{m_I}{(\hbar k)^2} \tag{5.23}$$

$$= U_I^2 \frac{V}{2\pi^2 \xi^3} \int_0^\infty d(\xi k) \frac{m_I \xi^2}{\hbar^2} \tag{5.24}$$

$$= U_I^2 \frac{V}{2\pi^2 \xi^3 \epsilon_0} \int_0^\infty d\tilde{k}. \tag{5.25}$$

We vinden dan dat we de term die de directe interactie energie van het condensaat met de onzuiverheid vertegenwoordigt kunnen schrijven als:

$$\begin{aligned}
N_0 U_I(\vec{k}) &= N_0 \left(\frac{4\pi\hbar^2 a_{IB}}{m} + g_{IB}^2 \frac{V}{2\pi^2 \xi^3 \epsilon_0} \int_0^\infty d\tilde{k} \right) \\
&= N_0 \frac{4\pi\hbar^2 a_{IB}}{m} + \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{k},
\end{aligned} \tag{5.26}$$

hierbij hebben we de uitwerking (5.18) voor de voorfactor gebruikt. Deze energie bevat dus duidelijk een divergerende integraal, maar voor grote k wordt deze integraal juist gelijk aan de divergerende integraal in de energie die we hierboven berekend hebben. Als we nu dit divergerende deel van de directe interactie energie mee in rekening brengen zal de divergentie in de energie opgehoffen zijn:

$$\begin{aligned} \frac{E^{(2)}}{\epsilon_0} &= \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \left\{ 1 + \frac{\tilde{K}^2}{2\tilde{q}} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \right. \\ &\quad \left. \times \left[\ln\left(\left|1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}\right|\right) - \ln\left(\left|1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}} + \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}\right|\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Wat hier in feite gebeurt is dat het korte-golflengte (grote K) gedrag van de interactie niet correct beschreven wordt door de deltafunctie als interatomaire interactie-potentiaal. Hierdoor zal het integrandum voor grote K naar een constante gaan in plaats van naar nul te gaan. De Lippmann-Schwinger uitdrukking, voor de sterkte g van die deltafunctie, toont aan dat we de limietwaarde voor K naar oneindig terug mogen aftrekken van het integrand, het korte-afstandsgedrag doet er toch niet toe.

5.3 Energie van de grondtoestand

In de grondtoestand zal de onzuiverheid een golfvector $\vec{q} = 0$ hebben. We maken dan gebruik van de reeksontwikkeling van de \ln functie voor kleine x :

$$\ln(c + x) = \ln(c) + \frac{1}{c}x - \frac{1}{2c^2}x^2 + \frac{1}{3c^3}x^3 + O(x^4), \quad (5.28)$$

dit geeft (tot op vierde orde):

$$\ln(c - x) - \ln(c + x) = -\frac{2}{c}x - \frac{2}{3c^3}x^3. \quad (5.29)$$

Voor $q = 0$ vinden we dan (exact):

$$\frac{E^{(2)}(\tilde{q} = 0)}{\epsilon_0} = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \left[1 + \tilde{K} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \frac{-2}{1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}}} \right]. \quad (5.30)$$

Later zullen we ook de oplossing voor kleine \tilde{q} , maar verschillend van 0 nodig hebben, daarvoor vinden we benaderend:

$$\frac{E^{(2)}(\tilde{q})}{\epsilon_0} = \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \left\{ 1 + \tilde{K} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \left[\frac{-2}{1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}}} - \frac{2}{3(1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}})^3} \frac{4\tilde{q}^2}{\tilde{K}^2} \right] \right\}. \quad (5.31)$$

Voor de grondtoestand kunnen we de integraal nog analytisch uitwerken, dit geeft:

$$\frac{E^{(2)}(\tilde{q} = 0)}{\epsilon_0} = \frac{4\sqrt{2}}{3\pi}\alpha. \quad (5.32)$$

De interactie zal dus tot gevolg hebben dat de energie van de grondtoestand lineair zal stijgen als functie van de koppelingsparameter α , voor zwakke koppeling.

5.4 Effectieve massa

We gebruiken de effectieve massa benadering, deze zegt het volgende:

$$E(\vec{q}) - E(\vec{q} = 0) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{pol}}, \quad (5.33)$$

met m_{pol} de effectieve massa van het polaron. We kunnen dit tot op tweede orde schrijven als:

$$\begin{aligned} E(\vec{q}) - E(\vec{q} = 0) &= [E(\vec{q}) - E(\vec{q} = 0)] + [E^{(2)}(\vec{q}) - E^{(2)}(\vec{q} = 0)] \\ \Leftrightarrow \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{pol}} &= \frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} + [E^{(2)}(\vec{q}) - E^{(2)}(\vec{q} = 0)]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

We delen deze vergelijking nog door ϵ_0 :

$$\frac{\tilde{q}^2}{2} \frac{m_I}{m_{pol}} = \frac{\tilde{q}^2}{2} + \left[\frac{E^{(2)}(\tilde{q})}{\epsilon_0} - \frac{E^{(2)}(\tilde{q} = 0)}{\epsilon_0} \right] \quad (5.35)$$

$$\Leftrightarrow 1 - \frac{m_I}{m_{pol}} = -\frac{2}{\tilde{q}^2} \left[\frac{E^{(2)}(\tilde{q})}{\epsilon_0} - \frac{E^{(2)}(\tilde{q} = 0)}{\epsilon_0} \right]. \quad (5.36)$$

We bekijken de effectieve massa voor kleine \tilde{q} , hiervoor hebben we reeds een benadering voor de energie opgesteld in (5.31). Als we nog uitdrukking (5.30) gebruiken voor de energie met $\tilde{q} = 0$ vinden we :

$$\frac{E^{(2)}(\tilde{q})}{\epsilon_0} - \frac{E^{(2)}(\tilde{q} = 0)}{\epsilon_0} = -2\frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \frac{1}{3(1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}})^3} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \frac{4\tilde{q}^2}{\tilde{K}}, \quad (5.37)$$

en dus:

$$1 - \frac{m_I}{m_{pol}} = \frac{16\alpha}{3\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \frac{1}{(1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2}})^3} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \frac{1}{\tilde{K}} \quad (5.38)$$

$$= \frac{16\alpha}{3\pi} \int_0^\infty d\tilde{K} \frac{\tilde{K}^2}{(\tilde{K} + \sqrt{\tilde{K}^2 + 2})^3} \sqrt{\frac{1}{2 + \tilde{K}^2}} \quad (5.39)$$

De integraal kan analytisch opgelost worden en geeft:

$$\int_0^\infty dK \frac{K^2}{(K + \sqrt{K^2 + 2})^3} \sqrt{\frac{1}{2 + K^2}} = \frac{2}{27} - \frac{\pi}{54} + \frac{7\sqrt{2}}{324} \arctan\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \quad (5.40)$$

$$= 0.04282... \quad (5.41)$$

We vinden dus voor de effectieve massa:

$$1 - \frac{m_I}{m_{pol}} \approx 0.0727\alpha \quad (5.42)$$

$$\Leftrightarrow \frac{m_I}{m_{pol}} \approx 1 - 0.0727\alpha \quad (5.43)$$

$$\Leftrightarrow m_{pol} \approx \frac{m_I}{1 - 0.0727\alpha} \quad (5.44)$$

De effectieve massa zal dus een stijgend verloop hebben in functie van de koppingsparameter α .

5.5 Grootte van het polaron

Als we de uitdrukking (5.14) voor de energie bekijken:

$$E^{(2)} = \sum_{\vec{K}} \frac{|V_{\vec{K}}|^2}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2(\vec{q}-\vec{K})^2}{2m_I} - \epsilon_{\vec{K}}}, \quad (5.45)$$

en we deze vergelijken met de uitdrukking (4.13) voor de energie bij sterke koppeling:

$$E^{sk} = - \sum_{\vec{K}} \frac{|V_{\vec{K}}|^2}{\epsilon_{\vec{k}}} |\rho_{\vec{K}}|^2, \quad (5.46)$$

zien we dat deze uitdrukkingen hetzelfde zijn als we voor de dichtheid bij zwakke koppeling volgende uitdrukking nemen:

$$|\rho_{\vec{K}}|^2 = - \frac{\epsilon_{\vec{K}}}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m_I} - \frac{\hbar^2(\vec{q}-\vec{K})^2}{2m_I} - \epsilon_{\vec{K}}}. \quad (5.47)$$

Als we hierin de Bogoliubov dispersie (5.4) invullen vinden we voor de grondtoestand ($\vec{q} = 0$):

$$|\rho_{\vec{K}}|^2 = \frac{\frac{\hbar^2}{2m_I} K \sqrt{K^2 + 2/\xi^2}}{\frac{\hbar^2 K^2}{2m_I} + \frac{\hbar^2}{2m_I} K \sqrt{K^2 + 2/\xi^2}}. \quad (5.48)$$

Als we de massa's nog gelijk stellen en renormaliseren zodat de dichtheid gelijk wordt aan 0 voor $k \rightarrow \infty$ hebben we:

$$|\rho_{\tilde{K}}|^2 = \frac{\tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2+2}}{\tilde{K}^2 + \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2+2}} - \frac{1}{2}. \quad (5.49)$$

Deze functie is weergegeven in figuur 5.1. Om een maat voor de grootte te hebben berekenen we de breedte bij half maximum. Het maximum bevindt zich bij $K \rightarrow 0$ en is gelijk aan $1/2$. Het half maximum wordt dus bereikt als:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2+2}}{\tilde{K}^2 + \tilde{K}\sqrt{\tilde{K}^2+2}} - \frac{1}{2} &= \frac{1}{4} \\ \Leftrightarrow K &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.50)$$

De echte grootte van het polaron r_p , in de reële ruimte, zal van de orde van de inverse zijn:

$$r_p \approx 2 \quad (5.51)$$

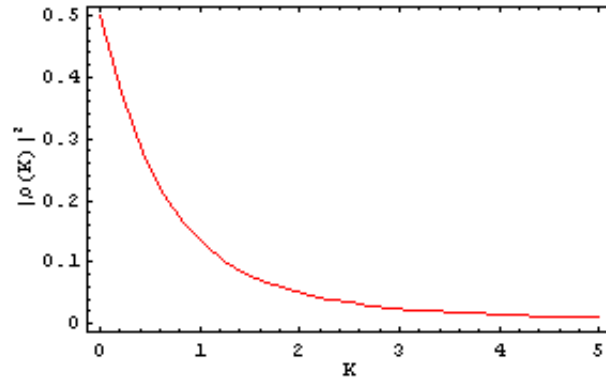
Uit deze hele oppervlakkige afschatting van de grootte van het polaron blijkt dat de grootte onafhankelijk is van de koppelingsparameter. We zien echter in figuur 5.1 dat $|\rho_{\tilde{K}}|^2$ een lange staart heeft voor grote K waaruit volgt dat de grootte in de reële ruimte ook een lange staart zal hebben, wat een aanwijzing is dat het polaron een gedelokaliseerde toestand is bij zwakke koppeling.

5.6 Onzuiverheid met impuls

5.6.1 Energie

Als we de uitdrukking (5.27) voor de energie bekijken, zien we dat deze nog altijd in bepaalde omstandigheden zal divergeren, het argument van de eerste ln kan immers 0 worden voor een bepaalde waarde van \tilde{q} . We kijken eerst voor welke \tilde{K} -waarde het argument van de ln 0 wordt:

$$\begin{aligned} 1 + \sqrt{1 + \frac{2}{\tilde{K}^2} - \frac{2\tilde{q}}{\tilde{K}}} &= 0 \\ \Leftrightarrow \sqrt{\tilde{K}^2+2} &= 2\tilde{q} - \tilde{K} \\ \Leftrightarrow \tilde{K}^2+2 &= 4\tilde{q}^2 + \tilde{K}^2 - 4\tilde{q}\tilde{K} \\ \Leftrightarrow \tilde{K} &= \frac{4\tilde{q}^2-2}{4\tilde{q}}. \end{aligned} \quad (5.52)$$



Figuur 5.1: Een ruwe afschatting van het kwadraat van de Fourier getransformeerde van de dichtheid bij zwakke koppeling.

Nu merken we op dat we enkel over positieve K -waarden integreren, dus voor elke \tilde{q} -waarde waarvoor de uitdrukking (5.52) positief is divergeert de integraal en hebben we dus geen oplossing, dit geeft als voorwaarde op \tilde{q} om een convergerende integraal te hebben:

$$\begin{aligned}
 & \frac{4\tilde{q}^2 - 2}{4\tilde{q}} < 0 \\
 \Leftrightarrow & 4\tilde{q}^2 - 2 < 0 \\
 \Leftrightarrow & \tilde{q}^2 < \frac{1}{2} \\
 \Leftrightarrow & |\tilde{q}| < \sqrt{\frac{1}{2}}
 \end{aligned} \tag{5.53}$$

Het blijkt dus dat er zich bij \tilde{q} -waarden groter dan $\sqrt{1/2}$ een anomalie voordoet. We bekijken deze waarde iets beter, deze stelt een onzuiverheid voor met een kinetische energie

$$\frac{\hbar^2 \tilde{q}^2}{2m\xi^2} = \frac{\tilde{q}^2 \epsilon_0}{2} = \frac{\epsilon_0}{4}. \tag{5.54}$$

Volgens het Landau criterium^{5.1} kan een bewegend deeltje in een condensaat slecht excitaties opwekken als aan volgende voorwaarde voor de snelheid van het deeltje voldaan is:

$$v > \frac{\epsilon_K}{\hbar K}, \tag{5.55}$$

^{5.1}Zie de cursus Superfluiditeit en supergeleiding van Prof. Dr. J. Tempere.

bij lagere snelheid zal het deeltje geen wrijving ondervinden. We kunnen deze voorwaarde omschrijven als een voorwaarde op de golfvector:

$$\tilde{k} = \frac{m\xi v}{\hbar} > \frac{m\xi\epsilon_K}{\hbar^2 K} \quad (5.56)$$

We berekenen nu de minimale golfvector waarvoor er een excitatie kan gecreëerd worden. Hiertoe vullen we het Bogoliubov spectrum (5.4) in, we zoeken dus het minimum van volgende uitdrukking:

$$\frac{m\xi\epsilon_K}{\hbar^2 K} = \frac{1}{2}\sqrt{(\xi K)^2 + 2}. \quad (5.57)$$

Afleidende en gelijk aan nul stellen van deze uitdrukking levert (we gaan over op de dimensieloze variabele $\tilde{K} = \xi K$):

$$\frac{\tilde{K}}{2\sqrt{\tilde{K}^2 + 2}} = 0 \quad (5.58)$$

$$\Leftrightarrow K = 0 \quad (5.59)$$

Als we dit terug invullen in het criterium van Landau vinden we dat een bewegend deeltje met een golfvector groter dan $\sqrt{1/2}$ een excitatie kan creëren. De snelheid die overeen komt met deze golfvector is de superfluïde kritische snelheid in het condensaat. Voor hogere golfvectoren kunnen we het systeem niet meer beschrijven met de tweede orde storingsenergie en moet men naar een hogere orde overgaan voor de berekening. Dit geeft wel een mooie onafhankelijke bevestiging voor onze theorie van de zwakke koppeling en linkt deze aan het Landau criterium voor superfluiditeit.

5.6.2 Levensduur

Een andere belangrijke eigenschap van het polaron voor experimentele metingen is de levensduur. Deze kunnen we via het formalisme van de Greense functie^{5.2} berekenen, welk ook een soort van storingsrekening is en reeds met succes werd gebruikt voor het Frölich polaron bij zwakke koppeling. We kunnen dit formalisme overnemen en gewoon de interactie amplitude en de dispersie aanpassen voor ons systeem, we beginnen met een korte inleiding over de Greense functie theorie.

De Greense functie $G(k, t)$ geeft de propagatie in de tijd van een deeltje in de toestand k . De Fourier getransformeerde van de Greense functie van

^{5.2}Zie de cursus Vaste Stoffysica 2 van Prof. Dr. J. Tempere.

een vrij deeltje is gegeven door:

$$G_0(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{\hbar k^2}{2m} + i\delta}, \quad (5.60)$$

voor een massaloos fonon-achtig deeltje (zoals de Bogoliubov excitaties) is dit:

$$D_0(\vec{k}, \omega) = \frac{2\omega_{\vec{k}}}{\omega^2 - \omega_{\vec{k}}^2 + i\delta}. \quad (5.61)$$

Nu kan men dit formalisme ook gebruiken om interacties tussen deeltjes te beschrijven. Hierdoor kan men quasi deeltjes krijgen (zoals het polaron), die een benaderende eigentoestand zijn met een eindige levensduur. Uit de theorie volgt dan dat een pool van de Greense functie van een quasi deeltje geschreven kan worden als $\omega = E_k/\hbar - i\Gamma_k/\hbar$, met E_k de energie en $1/\Gamma_k$ de levensduur. Een manier om de Greense functie van het quasi-deeltje te schrijven is via de Dysonvergelijking:

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E_{\vec{k}}/\hbar + i\delta - \Sigma(\vec{k}, \omega)}, \quad (5.62)$$

met Σ de zelfenergie en E_k de energie van het systeem zonder interactie. Hieruit volgt dat men uit het reële deel van de zelfenergie de correctie op de energie kan krijgen en uit het imaginaire deel de levensduur. De laagste orde zelfenergie voor een polaron Hamiltoniaan wordt gegeven door:

$$\Sigma_0(\vec{k}, \omega) = i \int \frac{d\nu}{2\pi} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{|V(\vec{q})|^2}{\hbar^2} G_0(\vec{k} - \vec{q}, \omega - \nu) D_0(\vec{q}, \nu). \quad (5.63)$$

Als men hierin de Greense functie voor de ongestoorde onzuiverheid en de Bogoliubov excitatie invult krijgt men na enig rekenwerk:

$$\Sigma_0(\vec{k}, \omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \frac{|V_{\vec{q}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \frac{\hbar(\vec{k}-\vec{q})^2}{2m_I} - \omega_{\vec{q}} + i\delta}. \quad (5.64)$$

Als we hierin nu de interactie amplitude (5.3) en de Bogoliubov dispersie (5.4) invullen vinden we:

$$\Sigma_0(\vec{k}, \omega) = \frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int d\vec{q} \left(\frac{(\xi q)^2}{2 + (\xi q)^2} \right)^{1/2} \frac{1}{\omega - \frac{\hbar(\vec{k}-\vec{q})^2}{2m_I} - \frac{\hbar q}{2m_B} \sqrt{q^2 + 2/\xi^2} + i\delta}. \quad (5.65)$$

Nu gaan we nog over op bolcoördinaten, we stellen de massa's gelijk aan elkaar en gebruiken de dimensieloze eenheden, we vinden dan:

$$\begin{aligned}
\Sigma_0(\vec{k}, \omega) &= \frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^3 \hbar^2} \frac{2m}{\hbar} \int d\vec{q} \left(\frac{(\xi q)^2}{2 + (\xi q)^2} \right)^{1/2} \\
&\times \frac{1}{\frac{2m\omega}{\hbar} - (\vec{k} - \vec{q})^2 - q\sqrt{q^2 + 2/\xi^2} + i\delta} \\
&= \frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2m}{\hbar} \int_{-1}^1 d\cos(\theta) \int_0^\infty dq q^2 \left(\frac{(\xi q)^2}{2 + (\xi q)^2} \right)^{1/2} \\
&\times \frac{1}{\frac{2m\omega}{\hbar} - k^2 - q^2 + 2kq\cos(\theta) - q\sqrt{q^2 + 2/\xi^2} + i\delta} \\
&= \frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2m}{\hbar \xi} \int_{-1}^1 d\cos(\theta) \int_0^\infty d\tilde{q} \tilde{q}^2 \left(\frac{\tilde{q}^2}{2 + \tilde{q}^2} \right)^{1/2} \\
&\times \frac{1}{\frac{2m\xi^2\omega}{\hbar} - \tilde{k}^2 - \tilde{q}^2 + 2\tilde{k}\tilde{q}\cos(\theta) - \tilde{q}\sqrt{\tilde{q}^2 + 2} + i\delta}. \tag{5.66}
\end{aligned}$$

Als we nu nog de energie eenheid $\epsilon_0 = \hbar^2/(m_I \xi^2)$ invullen, vinden we voor de voorfactor:

$$\frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{2m}{\hbar \xi} = \frac{g_{IB}^2 N_0 V}{(2\pi)^2 \hbar} \frac{2}{\epsilon_0 \xi^3} = \frac{\alpha}{4\pi \hbar} \left(\frac{m_I}{m_r} \right)^2 \epsilon_0, \tag{5.67}$$

de massa factor geeft weer een 4 voor gelijke massa's. Voor de integraal over $\cos(\theta)$ kunnen we de formule van Plemelj^{5.3} gebruiken, deze stelt:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int \frac{f(x)}{x + i\delta} dx = \mathcal{P} \int \frac{f(x)}{x} dx - i\pi \int f(x) \delta(x) dx, \tag{5.68}$$

met \mathcal{P} de hoofdwaaarde. Het reële deel zal ons terug de correctie op de energie geven die we hierboven hebben berekend met de gewone perturbatietheorie. Voor het imaginaire deel vinden we (met $\cos(\theta) = x$, $\omega_0 = \frac{\hbar}{m\xi^2}$):

$$\begin{aligned}
\frac{Im(\Sigma_0)}{\epsilon_0} &= -\frac{\alpha}{\hbar} \int_{-1}^1 dx \int_0^\infty d\tilde{q} \tilde{q}^2 \left(\frac{\tilde{q}^2}{2 + \tilde{q}^2} \right)^{1/2} \\
&\times \delta \left(2\frac{\omega}{\omega_0} - \tilde{k}^2 - \tilde{q}^2 + 2\tilde{k}\tilde{q}x - \tilde{q}\sqrt{\tilde{q}^2 + 2} \right). \tag{5.69}
\end{aligned}$$

^{5.3}Zie de cursus Complexe Analyse en Speciale Functies van Prof. Dr. J. Tempere.

We kunnen de δ -functie nog schrijven als:

$$\begin{aligned} & \delta \left(2 \frac{\omega}{\omega_0} - \tilde{k}^2 - \tilde{q}^2 + 2\tilde{k}\tilde{q}x - \tilde{q}\sqrt{\tilde{q}^2 + 2} \right) \\ &= \frac{1}{2\tilde{k}\tilde{q}} \delta \left(x - \left(-\frac{\omega}{\tilde{k}\tilde{q}\omega_0} + \frac{\tilde{k}^2}{2\tilde{k}\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}^2}{2\tilde{k}\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}}{2\tilde{k}\tilde{q}}\sqrt{\tilde{q}^2 + 2} \right) \right). \end{aligned} \quad (5.70)$$

Aangezien de integraal over x slechts van -1 tot 1 loopt levert de δ -functie een voorwaarde op \tilde{q} , namelijk:

$$-1 < -\frac{\omega}{\tilde{k}\tilde{q}\omega_0} + \frac{\tilde{k}^2}{2\tilde{k}\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}^2}{2\tilde{k}\tilde{q}} + \frac{\tilde{q}}{2\tilde{k}\tilde{q}}\sqrt{\tilde{q}^2 + 2} < 1. \quad (5.71)$$

Als we hierin nog de dispersie van een vrij deeltje invullen: $\omega = \frac{\hbar\tilde{k}^2}{2m\xi^2}$, vinden we:

$$|\tilde{q} + \sqrt{\tilde{q}^2 + 2}| < 2\tilde{k}. \quad (5.72)$$

Omdat \tilde{q} altijd groter dan nul is in de integraal kunnen we de absolute waarde weglaten en deze voorwaarde verder uitwerken tot:

$$\tilde{q} < \frac{4\tilde{k}^2 - 2}{4}, \quad (5.73)$$

de integraal over \tilde{q} gaat dus slechts tot deze bovengrens, voor het volgende stellen we $\tilde{Q} = \frac{4\tilde{k}^2 - 2}{4}$. Verder blijkt dat we nog een voorwaarde op \tilde{k} hebben door $\tilde{q} > 0$ te eisen, dit geeft:

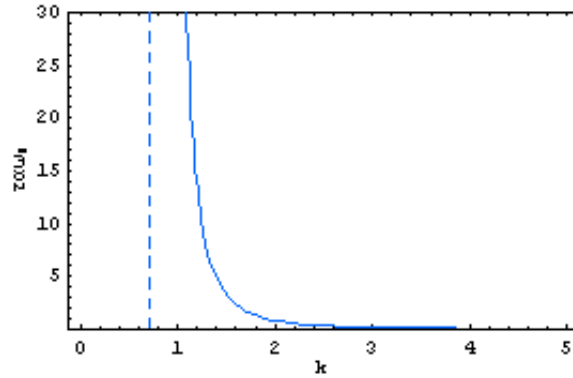
$$\frac{4\tilde{k}^2 - 2}{4} > 0 \quad (5.74)$$

$$\Leftrightarrow \tilde{k} > \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (5.75)$$

dit is weer juist het Landau criterium. Onzuiverheden met een golfvector kleiner dan het Landau criterium hebben tot eerste benadering een oneindige levensduur. Dit geeft dan voor het imaginaire deel een integraal die we kunnen uitwerken:

$$\frac{\Im(\Sigma_0)}{\omega_B} = -\frac{\alpha}{2\tilde{k}} \int_0^{\tilde{Q}} d\tilde{q}\tilde{q} \left(\frac{\tilde{q}^2}{2 + \tilde{q}^2} \right)^{1/2} \quad (5.76)$$

$$= -\frac{\alpha}{2\tilde{k}} \frac{1}{2\sqrt{\tilde{Q}^2 + 2}} \left(2\tilde{Q} + \tilde{Q}^3 - 2\sqrt{\tilde{Q}^2 + 2} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\tilde{Q}}{\sqrt{2}}\right) \right) \quad (5.77)$$



Figuur 5.2: De levensduur van het polaron als functie van de golfvector. Voor golfvector onder de stippellijn is de levensduur oneindig.

De levensduur wordt uiteindelijk gegeven door: $\tau = -\Im(\Sigma_0)^{-1}$ en is dus gegeven door:

$$\tau(k) = \left(\frac{\alpha\omega_B}{2k} \frac{1}{2\sqrt{\tilde{Q}^2 + 2}} \left(2\tilde{Q} + \tilde{Q}^3 - 2\sqrt{\tilde{Q}^2 + 2} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\tilde{Q}}{\sqrt{2}}\right) \right) \right)^{-1}, \quad (5.78)$$

deze is weergegeven in figuur 5.2. We kunnen dit intuïtief begrijpen door in te zien dat indien het polaron trager gaat dan het Landau criterium het geen wrijving zal ondervinden en dus in ideale omstandigheden een oneindige levensduur zal hebben. Als het polaron echter sneller gaat dan het criterium zal het een Bogoliubov excitatie creëren, waardoor de impuls zal verlagen, met een eindige levensduur tot gevolg.

6 Variationale padintegraal methode

In de vorige hoofdstukken zagen we dat de energie in functie van de koppingsparameter een lineair stijgend verloop heeft voor zwakke koppeling en een kwadratisch dalend verloop voor sterke koppeling. Het is duidelijk dat deze twee regimes niet zomaar aan elkaar gelijmd kunnen worden door perturbatierekening of de variationele aanpak met een product ansatz. Ergens moet er zich dus een overgang voordoen tussen de twee regimes. Hiertoe gebruiken we de methode van de variationele padintegraal, welke gebruikt kan worden om de energie van het systeem te berekenen voor willekeurige koppelingssterkte. Eerst zal er iets meer gezegd worden over het formalisme van de padintegraal, waarin deze methode ontwikkeld is. Daarna gebruiken we het resultaat van Feynman om de Jensen-Feynman ongelijkheid toe te passen op ons systeem. We bekijken ook nog de limietgevallen van sterke en zwakke koppeling en proberen een link te leggen met de resultaten uit de twee vorige hoofdstukken. Uiteindelijk bekijken we het resultaat voor een systeem waarin de massa van de onzuiverheid gelijk is aan deze van de bosonen. We berekenen ook uitdrukkingen voor de effectieve massa en de grootte van het polaron en kijken hoe deze variëren met de sterkte van de koppeling.

6.1 Formalisme

De padintegraal is gedefinieerd als de overgangsamplitude om gedurende een tijdsinterval T van een positie x_1 naar een positie x_2 te gaan (ook wel de propagator genoemd). Hij is gegeven door:

$$G(x_2, T; x_1) = \langle x_2 | e^{-i\hat{H}T/\hbar} | x_1 \rangle \quad (6.1)$$

$$= \int_{x(0)=x_1}^{x(t)=x_2} \mathcal{D}(x) e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}}, \quad (6.2)$$

met \mathcal{S} de klassieke actie. De betekenis van bovenstaande uitdrukking is dat men integreert over alle mogelijke paden die het deeltje kan afleggen van x_1 naar x_2 , waarbij er aan elk pad een gewicht wordt toegekend dat afhankelijk is van de actie.

Het is mogelijk om een link te leggen tussen de padintegraal en de statistische fysica door gebruik te maken van een imaginaire tijd: $t \rightarrow it = \tau$, en als bovengrens voor deze imaginaire tijd $\beta\hbar$ (met $\beta = 1/(k_b T)$, T is hier de temperatuur en niet het tijdsinterval) te beschouwen. Dit komt overeen met de substitutie $T \rightarrow -i\beta\hbar$ (met T het tijdsinterval) in bovenstaande formule. Als we nu nog het begin en eindpunt hetzelfde beschouwen en erover

integreeren vinden we:

$$\int dx G(x, -i\beta\hbar; x) = \int dx \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle \quad (6.3)$$

$$= \int dx \sum_{\alpha} \langle x | \alpha \rangle e^{-\beta E_{\alpha}} \langle \alpha | x \rangle \quad (6.4)$$

$$= \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \int dx |\langle x | \alpha \rangle|^2 \quad (6.5)$$

$$= \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad (6.6)$$

$$= \mathcal{Z} \quad (6.7)$$

$$= e^{-\beta\mathcal{F}}. \quad (6.8)$$

Met \mathcal{Z} de toestandssom en \mathcal{F} de vrije energie van het systeem. Dit is een zeer belangrijke formule, want als men de toestandssom of de vrije energie van een systeem kent kan men alle statistische eigenschappen van het systeem berekenen. In het imaginaire tijd formalisme wordt de padintegraal gegeven door:

$$G(x, -i\beta\hbar; x) = \int_{x(0)=x}^{x(t)=x} \mathcal{D}(x) e^{-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}'}, \quad (6.9)$$

Waar \mathcal{S}' de integraal over de imaginaire tijd van de imaginaire tijd Lagrangiaan is. Uit vergelijking (6.8) volgt ook de Jensen-Feynman ongelijkheid^{6.1}, gegeven door:

$$\mathcal{F} \leq \mathcal{F}_0 + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{S} - \mathcal{S}_0 \rangle_{\mathcal{S}_0}. \quad (6.10)$$

Waar \mathcal{F}_0 de vrije energie is van een modelsysteem en \mathcal{S}_0 de actie. De haakjes $\langle \dots \rangle_{\mathcal{S}_0}$ geven een verwachtingswaarde aan, berekend in het modelsysteem. Deze vergelijking is handig om toch een bovengrens te krijgen voor de vrije energie als de exacte padintegraal van het systeem niet analytisch berekenbaar is. We kunnen in dit formalisme ook de verwachtingswaarde van een operator berekenen als volgt:

$$\langle A \rangle_{\mathcal{S}_0} = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \int \mathcal{D}(x) A e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_0}. \quad (6.11)$$

^{6.1}Voor een meer gedetailleerde bespreking van deze ongelijkheid verwijzen we de lezer door naar het hoofdstuk over padintegralen in het boek Feynman, R.P. *Statistical Mechanics - A Set Of Lectures*, Seventh Printing, W.A. Benjamin, 1982.

6.2 Actie van het systeem

De techniek die we gaan gebruiken werd door Feynman uitgewerkt voor het polaron gevormd door een traag elektron in een ionair of polair kristal^{6.2}. We vertrekken van de generische polaron Hamiltoniaan:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\vec{k} \neq 0} \hbar \omega_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \neq 0} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger]. \quad (6.12)$$

Deze Hamiltoniaan is geschreven in functie van tweede kwantisatie operatoren (creatie en anihilatie), een actie is echter geschreven met eerste kwantisatie operatoren (positie en impuls), deze kunnen we schrijven als functie van de creatie en annihilatie operatoren:

$$\hat{Q}_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger] = \hat{Q}_{-\vec{k}}^\dagger \quad (6.13)$$

$$\hat{P}_{\vec{k}} = -i\sqrt{\frac{M\hbar\omega_{\vec{k}}}{2}} [\hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger - \hat{\alpha}_{-\vec{k}}] = \hat{P}_{-\vec{k}}^\dagger. \quad (6.14)$$

Om de eenheden te laten kloppen hebben we een massa van de Bogoliubov deeltjes geïntroduceerd, deze zal later wegvallen in het formalisme en speelt dus geen rol. De positie en impuls operator zijn geconjugeerde variabelen:

$$[\hat{Q}_{\vec{k}}, \hat{P}_{\vec{k}'}] = \frac{i\hbar}{2} [\hat{\alpha}_{\vec{k}} + \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger, \hat{\alpha}_{\vec{k}'}^\dagger - \hat{\alpha}_{-\vec{k}'}] = i\hbar \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (6.15)$$

Net als in hoofdstuk 3 kunnen we de Hamiltoniaan omschrijven naar:

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} [M\omega_{\vec{k}}^2 \hat{Q}_{\vec{k}}^2 + \frac{\hat{P}_{\vec{k}}^2}{M} + 2\sqrt{\frac{2M\omega_{\vec{k}}}{\hbar}} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{Q}_{\vec{k}}], \quad (6.16)$$

waarbij men moet opletten dat er bij de omzetting de arbitraire nulpuntsenergie $\sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}}/2$ gelijk aan nul werd gesteld. De vrijheidsgraden zijn nu de positie en de impuls van de onzuiverheid en voor elke bogoliubov mode de coördinaat en zijn tijdsafgeleide. Al de vrijheidsgraden zijn een functie van de tijd en om nu de link te leggen met de statistische fysica maken we deze imaginair. De vrije energie wordt dan gegeven door:

$$e^{-\beta \mathcal{F}} = \int d\vec{r} \left(\prod_{\vec{k}} \int d\vec{Q}_{\vec{k}} \right) G(\vec{r}, \{\vec{Q}_{\vec{k}}\}, -i\hbar\beta; \vec{r}, \{\vec{Q}_{\vec{k}}\}), \quad (6.17)$$

^{6.2}Wij houden het hier bij een oppervlakkige samenvatting, de gedetailleerde uitwerking is terug te vinden in het hoofdstuk over het polaron in het boek Feynman, R. P. *Statistical Mechanics - A Set of Lectures*.

met de propagator:

$$G\left(\vec{r}(T), \{\vec{Q}_{\vec{k}}(T)\}, T = -i\hbar\beta; \vec{r}(0), \{\vec{Q}_{\vec{k}}(0)\}\right) = \int \mathcal{D}\vec{r} \times \left(\prod_{\vec{k}} \int \mathcal{D}Q_{\vec{k}} \right) \times \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \mathcal{L}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}, \{\dot{Q}_{\vec{k}}, Q_{\vec{k}}\}) d\tau\right), \quad (6.18)$$

de imaginaire tijd lagrangiaan is gegeven door:

$$\mathcal{L}(\dot{\vec{r}}, \vec{r}, \{\dot{Q}_{\vec{k}}, Q_{\vec{k}}\}) = \frac{m_I}{2} \dot{\vec{r}}^2 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left[\frac{M\omega_{\vec{k}}^2}{2} \hat{Q}_{\vec{k}}^2 + \frac{M}{2} \dot{Q}_{\vec{k}}^2 + \sqrt{\frac{2M\omega_{\vec{k}}}{\hbar}} V_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{Q}_{\vec{k}} \right]. \quad (6.19)$$

De padintegraal over de vrijheidsgraden van de Bogoliubov deeltjes is deze van een harmonische oscillator met een externe kracht en kan worden uitgewerkt, de actie kan dan uiteindelijk geschreven worden als:

$$\mathcal{S} = \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{\vec{r}}^2(\tau) d\tau - \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \frac{\cosh[\omega_{\vec{k}}(|\tau - \sigma| - \hbar\beta/2)]}{\sinh(\hbar\beta\omega_{\vec{k}}/2)} e^{i\vec{k} \cdot [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]}. \quad (6.20)$$

Dit is de actie van een deeltje dat een nogal ongewone interactie ondergaat, het interageert met zichzelf op andere tijdstippen. Dit is het gevolg van het elimineren van de vrijheidsgraden van de Bogoliubov deeltjes. We kunnen dit verstaan doordat het deeltje eigenlijk interageert met de Bogoliubov deeltjes en deze dan weer terug interageren met het deeltje op andere tijdstippen. Door de Bogoliubov deeltjes te elimineren krijgen we een actie zoals hierboven, wat men een geretardeerde actie noemt. Deze padintegraal kunnen we echter niet uitwerken en we moeten nu dus een goed modelsysteem zoeken om er de Jensen-Feynman ongelijkheid op los te laten.

6.3 Het modelsysteem en de Jensen-Feynman ongelijkheid

Als we de literatuur erop naslagen vinden we dat Feynman reeds een geschikt modelsysteem gevonden heeft^{6.3}. Geschikt betekent hier dat we de padintegraal kunnen uitrekenen en dat de actie vergelijkbaar is met de actie van

^{6.3}Zie het hoofdstuk over het polaron in het boek Feynman, R. P. *Statistical Mechanics - A Set of Lectures*.

ons systeem (6.20), hierdoor kunnen we dan via de Jensen Feynman formule (6.10) een bovengrens voor de energie te vinden. Het modelsysteem dat Feynman beschouwde bestaat uit een massa m_I die via een veer met veerconstante MW^2 gekoppeld is aan een massa M . De imaginaire tijd Lagrangiaan voor dit systeem is:

$$\mathcal{L}_0(\dot{\vec{r}}, \vec{r}, \dot{\vec{Q}}, \vec{Q}) = \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) + \frac{M}{2} \dot{Q}^2(\tau) + \frac{MW^2}{2} [\vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau)]^2 \quad (6.21)$$

De padintegraal voor de \vec{Q} coördinaat is deze van een harmonische oscillator, waarvan het resultaat gekend is en we kunnen de vrijheidsgraad van de massa M dus elimineren, als we dit doen vinden we dat we de actie van het modelsysteem kunnen schrijven als:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_0 &= \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) d\tau \\ &+ \frac{MW^3}{8} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \frac{\cosh[W(|\tau - \sigma| - \hbar\beta/2)]}{\sinh(\hbar\beta W/2)} [\vec{r}(\tau) - \vec{r}(\sigma)]^2, \end{aligned} \quad (6.22)$$

hieruit is reeds de vrijheidsgraad van de massa M weggeïntegreerd. Als men de vrije energie van het modelsysteem en de verschillende verwachtingswaardes in de Jensen-Feynman ongelijkheid uitrekt, vindt men volgend resultaat:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &\leq \frac{3}{\beta} \left(\ln[2 \sinh\left(\frac{\hbar\Omega\beta}{2}\right)] - \ln[2 \sinh\left(\frac{\hbar\Omega\beta}{2\sqrt{1+M}}\right)] \right) \\ &- \frac{3}{2\beta} \frac{M}{m_I + M} \left[\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\Omega}{2}\right) - 1 \right] \\ &- \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} du \left(1 - \frac{u}{\hbar\beta} \right) \mathcal{M}_{M,\Omega}(k, u) \mathcal{G}(k, u), \end{aligned} \quad (6.23)$$

met $\mathcal{M}_{M,\Omega}(k, u)$ de zogenaamde geheugenfunctie, gegeven door:

$$\begin{aligned} &\mathcal{M}_{M,\Omega}(k, u) \\ &= \exp \left[-\frac{\hbar k^2}{2(m_I + M)} \left(u - \frac{1}{\beta\hbar} u^2 + \frac{M}{m_I} \frac{\cosh(\Omega\hbar\beta/2) - \cosh[\Omega(\hbar\beta/2 - u)]}{\Omega \sinh(\beta\hbar\Omega/2)} \right) \right], \end{aligned} \quad (6.24)$$

en $\mathcal{G}(k, u)$ de imaginaire-tijd Greense functie van het bogoliubov deeltje, gegeven door:

$$\mathcal{G}(k, u) = \frac{\cosh[\omega_{\vec{k}}(u - \hbar\beta/2)]}{\sinh[\hbar\beta\omega_{\vec{k}}/2]}. \quad (6.25)$$

De parameters Ω en M zijn nu variationele parameters die we zo moeten kiezen dat de vrije energie minimaal is. Om de formules iets overzichtelijker te houden zijn we nog overgegaan van de variationele parameter W , die we in de actie van het modelsysteem gebruikte, naar de parameter Ω via $\Omega = W\sqrt{1 + M/m_I}$. Het gebruikte formalisme is geldig voor willekeurige temperatuur, waarbij de temperatuursafhankelijk via de parameter $\beta = 1/k_B T$ gaat. De methodes die we voor zwakke en sterke koppeling in de vorige hoofdstukken gebruikten waren enkel geldig bij temperatuur gelijk aan 0.

6.4 Jensen-Feynman ongelijkheid in dimensieloze eenheden

We zouden graag terug overgaan naar de dimensieloze eenheden, in volgende tabel staat voor elke parameter de gebruikte eenheid en de dimensieloze parameter opgesomd:

parameter	eenheid	dimensieloze parameter
\mathcal{F}	$\epsilon_0 = \hbar^2/(m_I \xi^2)$	$\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{F}/\epsilon_0$
M	m_I	$\tilde{M} = M/m_I$
Ω	$\omega_0 = \hbar/(m_I \xi^2)$	$\tilde{\Omega} = \Omega/\omega_0$
u	$1/\omega_0$	$\tilde{u} = u\omega_0$
k	$1/\xi$	$\tilde{k} = \xi k$
m_B	m_I	$\tilde{m}_B = m_B/m_I$
β	$1/\epsilon_0$	$\tilde{\beta} = \beta\epsilon_0$

(6.26)

De eerste term in de Jensen-Feynman ongelijkheid wordt dan:

$$\frac{3}{\tilde{\beta}} \left(\ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \right) \right] - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2\sqrt{1+\tilde{M}}} \right) \right] \right) \epsilon_0, \quad (6.27)$$

de tweede term geeft:

$$\frac{3}{2\tilde{\beta}} \frac{\tilde{M}}{1+\tilde{M}} \left[\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \coth \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \right) - 1 \right] \epsilon_0, \quad (6.28)$$

en voor de derde term vinden we (we zetten de som nog om in een integraal):

$$\frac{V}{(2\pi\xi)^3} \int d\vec{k} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\epsilon_0^2} \int_0^{\tilde{\beta}} d\tilde{u} \left(1 - \frac{\tilde{u}}{\tilde{\beta}} \right) \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) \epsilon_0. \quad (6.29)$$

Als we de interactie amplitude invullen krijgen we voor de voorfactor van de derde term:

$$\begin{aligned}
\frac{V}{(2\pi\xi)^3} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\epsilon_0^2} &= \frac{V}{(2\pi\xi)^3} N_0 U_I^2 \sqrt{\frac{(\xi k)^2}{2 + (\xi k)^2}} \left(\frac{m_I \xi^2}{\hbar^2} \right)^2 \\
&= \frac{V}{(2\pi\xi)^3} \frac{V}{8\pi a_{BB} \xi^2} \left(\frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{V m_r} \right)^2 \sqrt{\frac{(\xi k)^2}{2 + (\xi k)^2}} \left(\frac{m_I \xi^2}{\hbar^2} \right)^2 \\
&= \frac{a_{IB}^2}{a_{BB} \xi} \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right)^2 \sqrt{\frac{(\xi k)^2}{2 + (\xi k)^2}}. \tag{6.30}
\end{aligned}$$

De geheugen functie in dimensieloze eenheden is:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) \\
&= \exp \left[-\frac{\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})} \left(\tilde{u} - \frac{1}{\tilde{\beta}} \tilde{u}^2 + \tilde{M} \frac{\cosh(\tilde{\Omega} \tilde{\beta}/2) - \cosh[\tilde{\Omega}(\tilde{\beta}/2 - \tilde{u})]}{\tilde{\Omega} \sinh(\tilde{\beta} \tilde{\Omega}/2)} \right) \right]. \tag{6.31}
\end{aligned}$$

In de Greense functie komt de Bogoliubov dispersie nog voor, in dimensieloze eenheden is deze:

$$\frac{\omega_{\vec{k}}}{\omega_0} = \frac{m_I \xi^2}{\hbar} \frac{\hbar}{2m_B} k \sqrt{k^2 + \frac{2}{\xi^2}} = \frac{1}{2\tilde{m}_B} \tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2} \tag{6.32}$$

Als we dit invullen in de Greense functie vinden we:

$$\mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \frac{\cosh \left[\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2} (2\tilde{u} - \tilde{\beta}) / (4\tilde{m}_B) \right]}{\sinh \left[\tilde{\beta} \frac{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{4\tilde{m}_B} \right]} \tag{6.33}$$

Verder merken we nog op dat de Greense functie en de geheugenfunctie beide invariant zijn onder de substitutie $\tilde{u}' = \tilde{\beta} - \tilde{u}$, hierdoor kunnen we het integratie domein van de \tilde{u} integratie halveren. Door deze symmetrie hebben we:

$$\int_{\tilde{\beta}/2}^{\tilde{\beta}} d\tilde{u} \left(\frac{\tilde{\beta} - \tilde{u}}{\tilde{\beta}} \right) \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u}' \frac{\tilde{u}'}{\tilde{\beta}} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}') \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}'), \tag{6.34}$$

hierdoor kunnen we onze integraal over \tilde{u} schrijven als:

$$\int_0^{\tilde{\beta}} d\tilde{u} \left(1 - \frac{\tilde{u}}{\tilde{\beta}} \right) \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}). \tag{6.35}$$

Als we nu alles terug samenbrengen zien we dat we de Jensen-Feynman ongelijkheid in dimensieloze eenheden kunnen schrijven als:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{F}} \leq & \frac{3}{\tilde{\beta}} \left\{ \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) \right] - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2 \sqrt{1 + \tilde{M}}} \right) \right] \right\} \\
& - \frac{3}{2 \tilde{\beta}} \frac{\tilde{M}}{1 + \tilde{M}} \left[\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \coth \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) - 1 \right] \\
& - \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right)^2 \int_0^\infty d\tilde{k} \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}).
\end{aligned} \tag{6.36}$$

6.5 Renormalisatie van de contact-interactie

In deze sectie tonen we aan dat de \tilde{k} integraal in de Jensen Feynman ongelijkheid divergeert voor kleine \tilde{u} , dit lossen we op door de onzuiverheid interactie amplitude U_I , welke nog in de Hamiltoniaan voorkomt in de term $N_0 U_I$, uit te schrijven tot tweede orde, zoals bij de zwakke koppeling. Hierdoor zal er een renormalisatie term tevoorschijn komen, welke de divergentie opheft.

Aangezien we naar het gedrag bij kleine \tilde{u} kijken zal $\tilde{\beta} > 2\tilde{u}$, we kunnen dan voor kleine \tilde{u} en grote \tilde{k} de Greense functie schrijven als:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\tilde{k} \rightarrow \infty, \tilde{u} \rightarrow 0) &= \frac{\exp \left[\tilde{k}^2 (\tilde{\beta} - 2\tilde{u}) / (4\tilde{m}_B) \right]}{\exp \left[\tilde{\beta} \frac{\tilde{k}^2}{4\tilde{m}_B} \right]} \\
&= \exp \left[-\tilde{k}^2 \tilde{u} / (2\tilde{m}_B) \right].
\end{aligned} \tag{6.37}$$

Voor de geheugen functie houden we bij kleine \tilde{u} enkel termen lineair in \tilde{u} over, we kunnen de cosh dan vervangen door de eerste twee termen van zijn reeksontwikkeling, dit geeft:

$$\begin{aligned}
& \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u} \rightarrow 0) \\
&= \exp \left(\frac{-\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})} \left[\tilde{u} + \tilde{M} \frac{\cosh[\tilde{\Omega} \tilde{\beta} / 2] - (\cosh[\tilde{\Omega}(\tilde{\beta} / 2)] - \sinh[\tilde{\Omega}(\tilde{\beta} / 2)] \tilde{\Omega} \tilde{u})}{\tilde{\Omega} \sinh(\tilde{\beta} \tilde{\Omega} / 2)} \right] \right) \\
&= \exp \left(\frac{-\tilde{k}^2}{2(1 + \tilde{M})} [\tilde{u} + \tilde{M} \tilde{u}] \right) \\
&= \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2}{2} \tilde{u} \right)
\end{aligned} \tag{6.38}$$

We vinden dan voor de \tilde{u} integraal in deze limieten:

$$\begin{aligned} \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) &= \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \exp\left(-\frac{\tilde{k}^2 \tilde{u} \tilde{m}_B + 1}{2 \tilde{m}_B}\right) \\ &= \frac{2\tilde{m}_B}{\tilde{k}^2(\tilde{m}_B + 1)} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tilde{k}^2 \tilde{\beta} \tilde{m}_B + 1}{4 \tilde{m}_B}\right)\right]. \end{aligned} \quad (6.39)$$

Voor grote \tilde{k} en kleine \tilde{u} wordt het integrandum van de \tilde{k} integraal dus gelijk aan:

$$-\frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B}\right)^2 \tilde{k}^2 \frac{2\tilde{m}_B}{\tilde{k}^2(\tilde{m}_B + 1)} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tilde{k}^2 \tilde{\beta} \tilde{m}_B + 1}{4 \tilde{m}_B}\right)\right]. \quad (6.40)$$

De tweede term is een brave Gauss die geen problemen zal veroorzaken, het probleem zit echter in de eerste term. Deze is een constante en geeft dus een divergerende \tilde{k} integraal. Bij de beschrijving van de zwakke koppeling zijn we ook zo'n term tegengekomen en net als toen ligt de oplossing ook nu bij de term $N_0 U_I$ die zich ook nog in de Hamiltoniaan bevindt. In hoofdstuk 2 toonden we aan dat indien we de interactie amplitude beschouwen tot tweede orde in de Lippmann Schwinger vergelijking we een divergerende k -integraal krijgen, het zal juist deze zijn die de bovenstaande divergentie zal opheffen. In hoofdstuk 2 hebben we een uitdrukking afgeleid die de sterkte van de contactpotentiaal in verband brengt met de verstrooiingslengte van de echte potentiaal, en juist is tot op tweede orde, uitdrukking (2.29). Deze uitdrukking geeft voor de bewuste term:

$$N_0 U_I = N_0 \left(\frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{m_r V} + U_I^2 \sum_{\tilde{k}} \frac{2m_r}{(\hbar k)^2} \right). \quad (6.41)$$

We kunnen in deze term nu ook overgaan naar de dimensieloze variabelen, als we dan nog de som omzetten naar een integraal en $N_0 = V/(8\pi a_{BB} \xi^2)$ invullen en de uitdrukking (2.30) voor U_I^2 gebruiken, vinden we:

$$\begin{aligned} N_0 U_I^2 \sum_{\tilde{k}} \frac{2m_r}{(\hbar k)^2} &= \frac{V}{8\pi a_{BB} \xi^2} \left(\frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{m_r V} \right)^2 \frac{2m_r}{\hbar^2} \frac{V}{(2\pi \xi)^3} \int d(\xi \tilde{k}) \frac{\xi^2}{(\xi k)^2} \\ &= \frac{\alpha}{2\pi} \frac{m_I}{m_r} \epsilon_0 \int_0^\infty d\tilde{k} \\ &= \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{1 + \tilde{m}_B}{\tilde{m}_B} \right)^2 \epsilon_0 \int_0^\infty d\tilde{k} 2 \frac{\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Deze integraal is dus juist gelijk aan de divergerende \tilde{k} en zal dus de divergentie opheffen. Het is een goede test dat het resultaat afgeleid uit de Jensen-Feynman ongelijkheid en het resultaat afgeleid uit de Lippmann-Schwinger vergelijking op die manier compatibel met elkaar zijn. Als we alles nog eens samenbrengen vinden we volgende uitdrukking voor de vrije energie:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}} \leq & \frac{3}{\tilde{\beta}} \left\{ \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \right) \right] - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2\sqrt{1+\tilde{M}}} \right) \right] \right\} \\ & - \frac{3}{2\tilde{\beta}} \frac{\tilde{M}}{1+\tilde{M}} \left[\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \coth \left(\frac{\tilde{\Omega}\tilde{\beta}}{2} \right) - 1 \right] + \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{1+\tilde{m}_B}{\tilde{m}_B} \right)^2 \\ & \times \int_0^\infty d\tilde{k} \left[\left(\frac{2\tilde{m}_B}{1+\tilde{m}_B} \right) - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2+\tilde{k}^2}} \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M}, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) \right]. \end{aligned} \quad (6.43)$$

6.6 Cut-off voor de \tilde{k} -integraal

In de vorige sectie hebben we de divergentie van de \tilde{k} -integraal voor kleine \tilde{u} opgeheven door de renormalisatie term. Hoewel de convergentie van de integraal (6.43) hiermee verzekerd is, is een cut-off in de golfgetallen nog steeds wenselijk om de minimizatie als functie van de variationele parameters M en Ω tot een goed einde te brengen. Een gelijkaardige situatie doet zich voor bij akoestische polaronen^{6.4}. Dit zijn elektronen die interageren met akoestische fononen. Voor kleine golfgetallen is het bogoliubov spectrum ook akoestisch, zodat deze analogie niet onverwacht is. Zowel het Bogoliubov spectrum als het akoestisch fonon spectrum worden in de limiet van grote golfgetallen (hoog-energetische process) onrealistisch voor de fysica van het systeem. Voor het Bogoliubov spectrum heeft dit, zoals eerder bleek uit de Lippmann-Schwinger renormalisatie, te maken met het feit dat op korte afstandsschaal de contactinteractie geen goede benadering meer is voor de echte interatomaire potentiaal. Een andere rechtvaardiging voor de cut-off is dat we bij zeer lage temperatuur werken en hoog energetische processen dus slechts een heel klein tot geen effect zullen hebben op ons systeem. We vertalen dit door in de \tilde{k} -integraal een cut-off K_c in te bouwen. De waarde van deze cut-off is een beetje arbitrair, maar een goede keuze blijkt $K_c = 1/r_e$ te zijn, met r_e de rijkweidte van de interatomaire potentiaal. Dit motiveren we door op te merken dat we door het gebruik van een contactpotentiaal voor de interatomaire interactie in hoofdstuk 2 reeds de effecten op een lengte schaal

^{6.4}F.M.Peeters en J.T.Devreese, Phys. Rev. B **32**, 3515 (1985).

kleiner dan r_e hebben verwaarloosd, wat in de k -ruimte overeen komt met het verwaarlozen van processen bij k -waardes groter dan $1/r_e$.

6.7 Zwakke koppeling limiet

De zwakke koppeling limiet vindt men door de $M \rightarrow 0$ te stellen in de uitwerking van de Jensen Feynman ongelijkheid. Dit komt overeen met als modelsysteem een vrij deeltje te beschouwen met als actie:

$$\mathcal{S}_0^{zwak} = \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) d\tau. \quad (6.44)$$

Dit is ook de methode die origineel door Feynman werd gebruikt. In de limiet $\tilde{M} \rightarrow 0$ wordt de geheugen functie:

$$\mathcal{M}_{\tilde{M} \rightarrow 0, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \exp\left(-\frac{\tilde{k}^2}{2} \left[\tilde{u} - \frac{1}{\tilde{\beta}} \tilde{u}^2\right]\right). \quad (6.45)$$

De eerste en de tweede term in de Jensen-Feynman ongelijkheid vallen beide weg, we houden dan nog over:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}} \leq & \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B}\right)^2 \int_0^\infty d\tilde{k} \left[\frac{2\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B}\right] \\ & - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M} \rightarrow 0, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}). \end{aligned} \quad (6.46)$$

Dit resultaat is niet meer afhankelijk van $\tilde{\Omega}$, voor zwakke koppeling is de variationele uitdrukking dus niet meer afhankelijk van de variationele parameters. Als we nu de limiet voor temperatuur naar nul bekijken vinden we voor de Greense functie:

$$\begin{aligned} \lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) &= \lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \frac{\exp\left(\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2 + 2}(\tilde{\beta} - 2\tilde{u})/(4\tilde{m}_B)\right)}{\exp\left(\tilde{\beta} \frac{\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{4\tilde{m}_B}\right)} \\ &= \exp\left(-\frac{2\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{4\tilde{m}_B} \tilde{u}\right). \end{aligned} \quad (6.47)$$

In de $\tilde{\beta} \rightarrow \infty$ limiet is de \tilde{u} integraal makkelijk te doen:

$$\int_0^\infty d\tilde{u} \exp\left(-\frac{2\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{4\tilde{m}_B} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2} \tilde{u}\right) = \frac{2\tilde{m}_B}{\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2 + 2} + \tilde{m}_B \tilde{k}^2} \quad (6.48)$$

Als de temperatuur gelijk aan 0 is, wordt de vrije energie gelijk aan de interne energie, we vinden dan:

$$\begin{aligned}\tilde{E} &\leq \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right)^2 \int_0^\infty d\tilde{k} \left[\left(\frac{2\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B} \right) - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \frac{2\tilde{m}_B}{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2 + \tilde{m}_B \tilde{k}^2}} \right] \\ &= \frac{\alpha}{2\pi} \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right) \int_0^\infty d\tilde{k} \left[1 - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2 + \tilde{m}_B \tilde{k}^2}} \right] \quad (6.49)\end{aligned}$$

Als we de massa's van de onzuiverheid en van de bosonen nu aan elkaar gelijk stellen ($\tilde{m}_B = 1$), zoals we in de vorige hoofdstukken deden, vinden we:

$$\begin{aligned}\tilde{E} &\leq \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{k} \left[1 - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \frac{2}{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2 + \tilde{k}^2}} \right] \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{3\pi} \alpha, \quad (6.50)\end{aligned}$$

dit is juist hetzelfde resultaat als we bij zwakke koppeling vonden (5.32). Als we de zwakke koppeling berekening doen zonder de eis dat de massa's van de onzuiverheid en van de bosonen gelijk zijn blijkt dat deze gelijkheid ook dan geldig is.

6.8 Sterke koppeling limiet

De sterke koppeling limiet vinden we door $M \rightarrow \infty$ te beschouwen. Dit komt overeen met een modelsysteem dat bestaat uit een deeltje dat via een veer aan een vast punt is verbonden, de actie hiervoor is:

$$\mathcal{S}_0^{sterk} = \int_0^{\hbar\beta} \left(\frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) + \frac{m_I \Omega}{2} r^2(\tau) \right) d\tau \quad (6.51)$$

De geheugen functie wordt in de limiet $M \rightarrow \infty$:

$$\mathcal{M}_{\tilde{M} \rightarrow \infty, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) = \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2 \cosh[\tilde{\Omega} \tilde{\beta}/2] - \cosh[\tilde{\Omega}(\tilde{\beta}/2 - \tilde{u})]}{2 \tilde{\Omega} \sinh(\tilde{\beta} \tilde{\Omega}/2)} \right), \quad (6.52)$$

de uitdrukking voor de vrije energie wordt dan:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}} \leq & \frac{3}{\tilde{\beta}} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) \right] - \frac{3}{2\tilde{\beta}} \left[\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \coth \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) - 1 \right] + \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{1 + \tilde{m}_B}{\tilde{m}_B} \right)^2 \\ & \times \int_0^\infty d\tilde{k} \left[\left(\frac{2\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B} \right) - \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \int_0^{\tilde{\beta}/2} d\tilde{u} \mathcal{G}(\tilde{k}, \tilde{u}) \mathcal{M}_{\tilde{M} \rightarrow \infty, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) \right]. \end{aligned} \quad (6.53)$$

We bekijken weer de $\tilde{\beta} \rightarrow \infty$ limiet, de Greense functie in deze limiet vonden we in uitdrukking (6.47), de geheugen functie wordt:

$$\begin{aligned} \lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \mathcal{M}_{\tilde{M} \rightarrow \infty, \tilde{\Omega}}(\tilde{k}, \tilde{u}) &= \lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2 \exp[\tilde{\Omega} \tilde{\beta}/2] - \exp[\tilde{\Omega}(\tilde{\beta}/2 - \tilde{u})]}{2 \tilde{\Omega} \exp(\tilde{\beta} \tilde{\Omega}/2)} \right) \\ &= \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2}{2} \frac{1 - \exp[-\tilde{\Omega} \tilde{u}]}{\tilde{\Omega}} \right). \end{aligned} \quad (6.54)$$

Als we dit invullen vinden we voor de energie bij temperatuur 0 (zonder de renormalisatie term):

$$\begin{aligned} \tilde{E} \leq & \frac{3}{2} \tilde{\Omega} - \frac{3}{4} \tilde{\Omega} - \frac{\alpha}{4\pi} \left(\frac{1 + \tilde{m}_B}{\tilde{m}_B} \right)^2 \\ & \times \int_0^\infty d\tilde{k} \left[\tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \int_0^\infty d\tilde{u} \exp \left(-\frac{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{2\tilde{m}_B} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2} \frac{1 - \exp[-\tilde{\Omega} \tilde{u}]}{\tilde{\Omega}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.55)$$

waar we gebruik maakten van:

$$\lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \frac{3}{\tilde{\beta}} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) \right] = \lim_{\tilde{\beta} \rightarrow \infty} \frac{3}{\tilde{\beta}} \ln \left[\exp \left(\frac{\tilde{\Omega} \tilde{\beta}}{2} \right) \right] = \frac{3}{2} \tilde{\Omega} \quad (6.56)$$

We bekijken weer het geval van gelijke massa's ($\tilde{m}_B = 1$), zodat we misschien een link kunnen leggen met het sterke koppeling resultaat. Als we de uitdrukking nog een beetje herschrijven, vinden we:

$$\begin{aligned} \tilde{E} \leq & \frac{3}{4} \tilde{\Omega} - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^\infty d\tilde{k} \tilde{k}^2 \sqrt{\frac{\tilde{k}^2}{2 + \tilde{k}^2}} \exp \left(-\frac{\tilde{k}^2}{2\tilde{\Omega}} \right) \\ & \times \int_0^\infty d\tilde{u} \exp \left(-\frac{\tilde{k} \sqrt{\tilde{k}^2 + 2}}{2} \tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2 \exp[-\tilde{\Omega} \tilde{u}]}{2 \tilde{\Omega}} \right). \end{aligned} \quad (6.57)$$

We zien dus dat we hetzelfde resultaat krijgen zoals bij de sterke koppeling als we de variationele parameter $\tilde{\Omega}$ vervangen door $1/\tilde{\lambda}^2$ en als

$$\int_0^\infty d\tilde{u} \exp\left(-\frac{\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2+2}}{2}\tilde{u} - \frac{\tilde{k}^2}{2}\frac{\exp[-\tilde{\Omega}\tilde{u}]}{\tilde{\Omega}}\right) \rightarrow \frac{2}{\tilde{k}\sqrt{\tilde{k}^2+2}}, \quad (6.58)$$

dit veronderstelt dat we het tweede deel van de exponent verwaarlozen. Dit is ook wat men doet bij de behandeling van het akoestisch polaron als men de limieten bekijkt^{6,5}, het blijkt echter dat dit enkel mag als we met een voldoende lage cut-off werken. Voor het akoestisch polaron is dit over het algemeen geen probleem omdat er zich daar een natuurlijke cut-off bevindt bij het einde van de Brillouin zone. In ons geval is de cut-off echter iets meer arbitrair en kunnen we niet zomaar het tweede deel van de exponent verwaarlozen.

6.9 Resultaten

In het volgende berekenen we de vrije energie in functie van de koppelingsparameter expliciet, we nemen hierbij aan dat de massa van de onzuiverheid gelijk is aan de massa van de bosonen ($\tilde{m}_B = 1$). Verder bekijken we nog enkele experimenteel interessante grootheden, namelijk de effectieve massa en de grootte van het polaron, in functie van de koppelingsparameter.

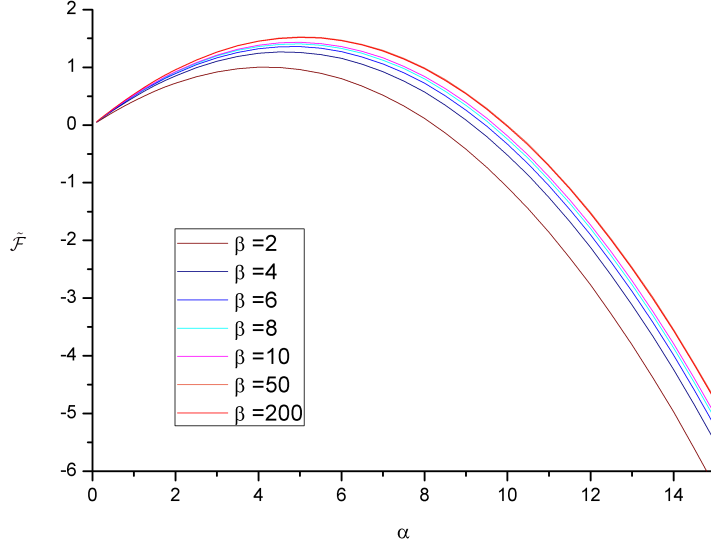
6.9.1 Vrije energie

In figuur 6.1 is de vrije energie van het polaron gegeven als functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen. We zien dat de vrije energie convergeert voor de limiet $T \rightarrow 0$. Verder heeft ze voor zwakke koppeling een stijgend verloop, zoals we zagen in hoofdstuk 5, en voor sterke koppeling een kwadratisch dalend verloop, zoals we zagen in hoofdstuk 4. Dit resultaat is dus consistent met de vorige hoofdstukken.

Het is belangrijk op te merken dat de vrije energie die we hier berekenen enkel het deel is dat met het polaron generisch systeem kan beschreven worden, verder is er nog een bijdrage $E_{GPB} + N_0U_I$ welke we niet in rekening hebben gebracht en ook nog afhankelijk is van de koppelingssterkte. We zien dat de bijdrage van het polaron positief is voor zwakke koppeling en negatief is voor sterke koppeling, dit wijst op een fase-overgang tussen de twee regimes.

We hebben ook de vrije energie in functie van de cut-off K_c bekeken, zie figuur 6.2. Het is duidelijk dat de vrije energie hetzelfde gedrag vertoont

^{6,5}F. M. Peeters en J. T. Devreese, Phys. Rev. B **32**, 3515 (1985).

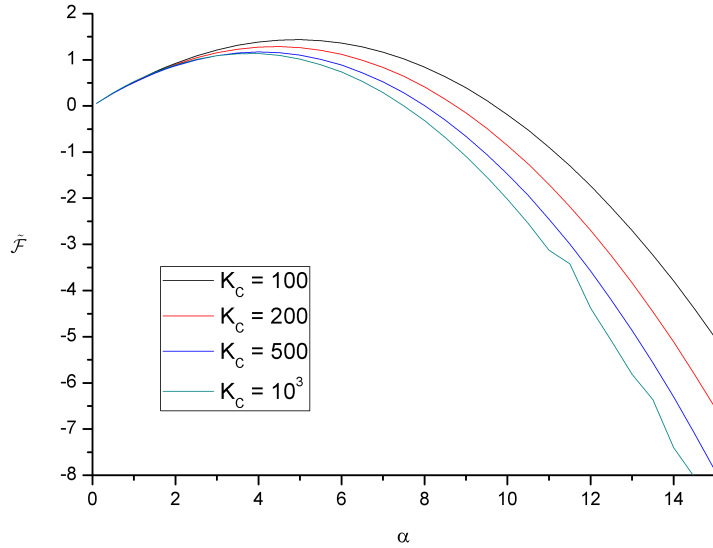


Figuur 6.1: De vrije energie van het polaron in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen.

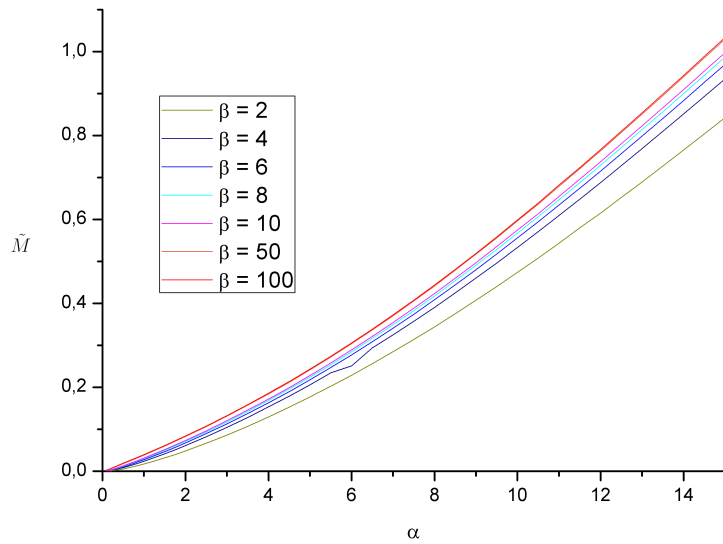
voor een verschillende cut-off en dat ze convergeert voor grote cut-off. We besluiten dat de cut-off een goede benadering was. Merk op dat er voor sterke koppeling bij $K_c = 10^3$ reeds numerieke ruis optreedt.

6.9.2 Effectieve massa

Uit de theorie van Feynman kan men ook een effectieve massa berekenen, hiervoor gebruikt men de padintegraal propagatie van een deeltje van $\vec{r}(0)$ naar een nabij gelegen punt $\vec{r}(\tau) = \vec{r}(0) + v\tau$, waarbij τ een imaginaire tijd is en v dus geen fysische snelheid. De resulterende transitie stelt men dan gelijk aan de padintegraal van een vrij deeltje met een effectieve massa m_{eff} : $\exp(-m_{pol}v^2\tau/2)$, waaruit dan m_{pol} kan berekend worden. Feynman merkte echter op dat de effectieve massa die men berekent met deze methode altijd slechts een paar percent zal verschillen van $m_I + M$, met M de variationele parameter die bij een minimum in de energie hoort. Als we dus het gedrag van M bekijken hebben we reeds een goed idee van wat er met de effectieve massa gebeurt. In figuur 6.3 is de dimensieloze variationele parameter \tilde{M} weergegeven voor een variërende koppelingssterkte en voor verschillende temperaturen. We zien dat de effectieve massa een stijgend verloop heeft, wat consistent is met het resultaat bij zwakke koppeling uit hoofdstuk 5.



Figuur 6.2: De vrije energie van het polaron in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende waarden voor de cut-off.



Figuur 6.3: De dienseloze variationele parameter \tilde{M} in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen.

6.9.3 De grootte van het polaron

In het huidige formalisme kunnen we de grootte van de relatieve coördinaat van het modelsysteem bepalen, als we dan de variationele parameters invullen die een minimum in de energie geven zal dit ons een afchatting van de grootte van het polaron geven. Eerst tonen we aan hoe het modelsysteem splitst in relatieve en een massacentrum coördinaten en dan berekenen we de verwachtingswaarde van de relatieve coördinaat.

De Lagrangiaan van het modelsysteem is gegeven door:

$$\mathcal{L}_0(\dot{\vec{r}}, \vec{r}, \dot{\vec{Q}}, \vec{Q}) = \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) + \frac{M}{2} \dot{Q}^2(\tau) + \frac{MW^2}{2} [\vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau)]^2. \quad (6.59)$$

We kunnen nu overgaan naar massacentrum en relatieve coördinaten:

$$\vec{R}(\tau) = \frac{m_I \vec{r}(\tau) + M \vec{Q}(\tau)}{m_I + M}; \quad (6.60)$$

$$\vec{x}(\tau) = \vec{r}(\tau) - \vec{Q}(\tau). \quad (6.61)$$

De Jacobiaan van deze transformatie is gelijk aan 1 en de inverse transformatie is:

$$\vec{r}(\tau) = \vec{R}(\tau) + \frac{M}{m_I + M} \vec{x}(\tau); \quad (6.62)$$

$$\vec{Q}(\tau) = \vec{R}(\tau) - \frac{M}{m_I + M} \vec{x}(\tau). \quad (6.63)$$

In deze nieuwe coördinaten ontkoppelt het systeem:

$$\mathcal{L}_0(\dot{\vec{x}}, \vec{x}, \dot{\vec{R}}, \vec{R}) = \frac{m_I + M}{2} \dot{R}^2 + \frac{m_I M}{2(m_I + M)} \dot{x}^2 + \frac{MW^2}{2} x^2. \quad (6.64)$$

Het systeem is dus ontkoppeld in een vrij deeltje met massa $m_I + M$ en een harmonische oscillator met veerconstante MW^2 en massa $\mu = m_I M / (m_I + M)$. De verwachtingswaarde van de relatieve coördinaat is dan gegeven door (zie (6.11)):

$$\langle x^2 \rangle_{s_0} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\vec{x} \int \mathcal{D}\vec{R} x^2 \exp(-\frac{1}{\hbar} \mathcal{S}_0[\vec{x}(\tau), \vec{R}(\tau)]), \quad (6.65)$$

met \mathcal{S}_0 de actie van het modelsysteem in relatieve en massacentrum coördinaten:

$$\mathcal{S}_0[\vec{x}(\tau), \vec{R}(\tau)] = \int_0^{\hbar\beta} \left(\frac{m_I + M}{2} \dot{R}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{x}^2 + \frac{MW^2}{2} x^2 \right) d\tau. \quad (6.66)$$

Door deze ontkoppeling kunnen we de toestandssom schrijven als een product $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{vrij} \mathcal{Z}_{ho}$. Nu merken we nog op dat x^2 onafhankelijk is van de massacentrum coördinaten en de integraal over deze coördinaten dus wegvalt met \mathcal{Z}_{vrij} . We moeten dus de verwachtingswaarde enkel nemen ten opzichte van de harmonische oscillator coördinaten:

$$\langle x^2 \rangle_{s_0} = \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}} \int \mathcal{D}\vec{x} x^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \left(\frac{\mu}{2} \dot{x}^2 + \frac{MW^2}{2} x^2 \right) d\tau \right\}. \quad (6.67)$$

Als we nu $\langle x^2 \rangle_{s_0}$ nog uitmiddelen over de imaginaire tijd is het duidelijk dat we dit als een afgeleide van de toestandssom kunnen schrijven:

$$\frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \langle x^2 \rangle_{s_0} d\tau = -\frac{2}{\beta} \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}} \frac{1}{W^2} \frac{\partial}{\partial M} \mathcal{Z}_{HO}. \quad (6.68)$$

De toestandssom van een harmonische oscillator is gekend, we gaan nu nog over naar de variationele parameter $\Omega = \sqrt{MW^2/\mu} = W\sqrt{1 + M/m_I}$, waardoor $W^2 dM = 2\mu d\Omega$, we vinden dan:

$$\frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \langle x^2 \rangle_{s_0} d\tau = -\frac{1}{\beta\mu\Omega} \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}} \frac{\partial}{\partial \Omega} \left(\frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\Omega/2)} \right)^3 \quad (6.69)$$

$$= -\frac{1}{\beta\mu\Omega} \frac{1}{\mathcal{Z}_{HO}} \frac{-3}{16} \hbar\beta \frac{\cosh(\beta\hbar\Omega/2)}{\sinh^4(\beta\hbar\Omega/2)} \quad (6.70)$$

$$= \frac{3\hbar}{2\mu\Omega} \coth(\beta\hbar\Omega/2). \quad (6.71)$$

Als we dit nog omzetten naar dimensieloze eenheden vinden we:

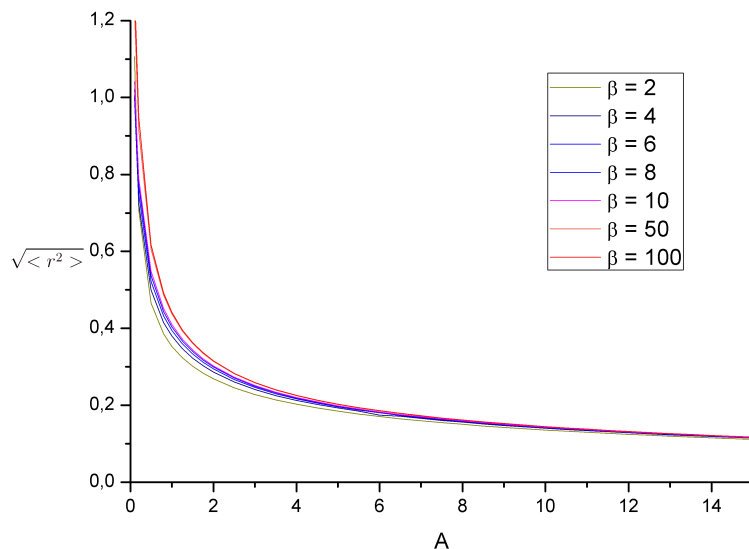
$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \langle x^2 \rangle_{s_0} d\tau &= \frac{3\hbar}{2\omega_0\tilde{\Omega}} \frac{m_I + M}{m_I M} \coth \left(\frac{\tilde{\beta}\tilde{\Omega}}{2} \right) \\ &= \frac{3m_I\xi^2}{2\tilde{\Omega}} \frac{1 + \tilde{M}}{M} \coth \left(\frac{\tilde{\beta}\tilde{\Omega}}{2} \right) \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \langle \tilde{x}^2 \rangle_{s_0} d\tau = \frac{3}{2\tilde{\Omega}} \frac{1 + \tilde{M}}{\tilde{M}} \coth \left(\frac{\tilde{\beta}\tilde{\Omega}}{2} \right). \quad (6.72)$$

In figuur 6.4 is de grootte van het polaron weergegeven:

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} \langle \tilde{x}^2 \rangle_{s_0} d\tau}, \quad (6.73)$$

in functie van de koppelingssterkte. Het blijkt dat de grootte een dalend verloop heeft in functie van de koppelingsparameter, met eerst een sterk dalend verloop bij zwakke koppeling en een traag dalend verloop bij sterke koppeling.



Figuur 6.4: De grootte van het polaron in functie van de koppelingsparameter.

6.10 Conclusie

We zien dus dat het regime van zwakke koppeling gekarakteriseerd wordt door een positieve energie bijdrage, een kleine effectieve massa en een groot polaron. Voor sterke koppeling is dit een negatieve energie bijdrage, een grote effectieve massa en een klein polaron, wat op een sterker gelokaliseerde toestand wijst. Dit wijst op een fase overgang bij de overgang tussen zwakke en sterke koppeling. We vermoeden dat dit een overgang is tussen een vrij polaron bij zwakke koppeling en 'self trapping' bij sterke koppeling, hierbij wordt het polaron opgesloten door de reactie van de omgeving op het deeltje zelf. Dit effect ziet men ook bij het akoestisch polaron^{6.6}. In het volgende hoofdstuk, waar we de theorie gebruiken voor een specifiek systeem met verschillende massa's ($\tilde{m}_B \neq 0$), zal de fase overgang beter zichtbaar zijn.

^{6.6}F.M.Peeters, J.T.Devreese, Phys.Rev. B **32**, 3515 (1985).

7 Experimentele realisatie

Voor deze thesis werd er samengewerkt met het 'Kirchhoff Institute for Physics' aan de universiteit van Heidelberg. Deze groep zal het polaron effect trachten te meten voor een onzuiverheidsaatom in een Bose-Einstein condensaat. Zij maken gebruik van een condensaat van natrium atomen, met als onzuiverheid een lithium atoom. In dit hoofdstuk wordt er iets meer gezegd over de realistische condities waarin een condensaat zich bevindt en hoe deze de parameters bepalen. Eerst geven we een kort overzicht van de resultaten die we nodig hebben uit de theorie van Bose-Einstein condensatie^{7.1}, dan beschrijven we enkele methodes om de koppelingssterkte te variëren en uiteindelijk vullen we de specifieke parameters voor het systeem in Heidelberg in de theorie in.

7.1 Algemeen

Tijdens een experiment wordt het condensaat steeds opgesloten in een magnetische val, deze geeft in zeer goede benadering aanleiding tot een parabolische opsluitingspotentiaal:

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}(K_1x^2 + K_2y^2 + K_3z^2). \quad (7.1)$$

Men noemt dit ook wel een harmonische val. De krachtconstanten K_i bepalen de sterkte van de val en zullen over het algemeen anisotroop zijn. Met de krachtsconstanten identificeerd men de klassieke oscillatiefrequenties $\omega_i = \sqrt{K_i/m_B}$, waarmee we de opsluitingspotentiaal kunnen schrijven als:

$$V(\vec{r}) = \frac{m_B}{2}(\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2). \quad (7.2)$$

Via de oscillatiefrequenties kan men de transitietemperatuur T_c berekenen, dit is de hoogste temperatuur waarbij een macroscopische bezetting van de laagste energie toestand optreedt, in 3 dimensies is deze is gegeven door:

$$k_B T_c = \hbar \bar{\omega} \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3}, \quad (7.3)$$

met $\bar{\omega} = (\omega_1\omega_2\omega_3)^{1/3}$, het geometrisch gemiddelde van de oscillatiefrequenties, N het aantal deeltjes in het gas en ζ de Riemann zeta functie.

^{7.1}Voor een uitvoerigere beschrijving verwijzen we naar de cursus *Superfluiditeit en supergeleiding* van Prof. Dr. J. Tempere.

Voor de beschrijving van een condensaat maakt men vaak gebruik van de Thomas-Fermi benadering. Deze stelt dat als men met voldoende atomen werkt ($N \gg 10^3$) de kinetische energie van de atomen kan verwaarloosd worden. Uit deze benadering volgt dat de grootte van het condensaat bepaald wordt door de Thomas-Fermi straal R_{TF} , gegeven door:

$$R_{TF} = a_{HO} \left(\frac{15Na_{BB}}{a_{HO}} \right)^{1/5}, \quad (7.4)$$

met $a_{HO} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$, de oscillatorlengte van de harmonische opsluiting. De betekenis van de Thomas-Fermi straal is dat er op een afstand groter dan R_{TF} van het middelpunt van de val geen condensaatatomen meer zijn. Tevens uit de Thomas-Fermi benadering volgt een uitdrukking voor de chemische potentiaal:

$$\mu = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{15Na_B}{a_{HO}} \right)^{2/5}. \quad (7.5)$$

Hieruit volgt nog volgende uitdrukking voor de dichtheid in het centrum van het condensaat:

$$n_0 = \frac{\mu}{U_k} = \frac{m_B}{4\pi\hbar^2 a_{BB}} \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{Na_{BB}}{a_{HO}} \right)^{2/5} = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{15Na_{BB}}{a_{HO}} \right)^{2/5} \frac{1}{a_{HO}^2 a_{BB}}, \quad (7.6)$$

Waarbij we de uitdrukking voor de interactie amplitude reeds in hoofdstuk 2 hebben afgeleid. De coherentielengte in het centrum is dan gegeven door:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{8\pi n_0 a_B}} = \left[\left(\frac{15Na_B}{a_{HO}} \right)^{2/5} \frac{1}{a_{HO}^2} \right]^{-1/2}. \quad (7.7)$$

Als we nu deze uitdrukking voor de coherentielengte invullen in de koppelingsparameter vinden we dat we (in de Thomas Fermi benadering) deze kunnen schrijven als een functie van de parameters die ons systeem beschrijven:

$$\alpha = \frac{a_{IB}^2}{a_{BB}\xi} = \left(\frac{15Na_B}{a_{HO}} \right)^{1/5} \frac{a_{IB}^2}{a_{BB}a_{HO}}. \quad (7.8)$$

7.2 Wijzigen van de koppelingssterkte

Het blijkt dat als we de waarden van de verschillende parameters van het specifieke systeem invullen in (7.8) we altijd in het regime van zwakke koppeling uitkomen. We zouden dus graag een methode hebben om deze parameter op te drijven. Een eerste mogelijkheid die onmiddellijk volgt uit

vergelijking (7.8) is te werken met meer atomen (N verhogen). Dit zal echter slechts een klein effect hebben door de wortel $1/5$ en dit zal ook moeilijk zijn omdat één van de voorwaarden voor een Bose-Einstein condensaat juist een voldoende ijl gas is, zodat het gas niet opwarmt door de toename van driedeeltesbotsingen. Een andere mogelijkheid lijkt om een sterkere opsluitingspotentiaal te gebruiken, waardoor de oscillatielengte a_{HO} zal dalen. Hierdoor zal de dichtheid van het condensaat echter weer toenemen, zodat men weer gelimiteerd is door de voorwaarde om een voldoende ijl gas te hebben. De laatste mogelijkheid om α te veranderen is door de verstrooiingslengtes te wijzigen, dit kan men doen door middel van een Feshbach resonantie, dit effect beschrijven we in de volgende sectie.

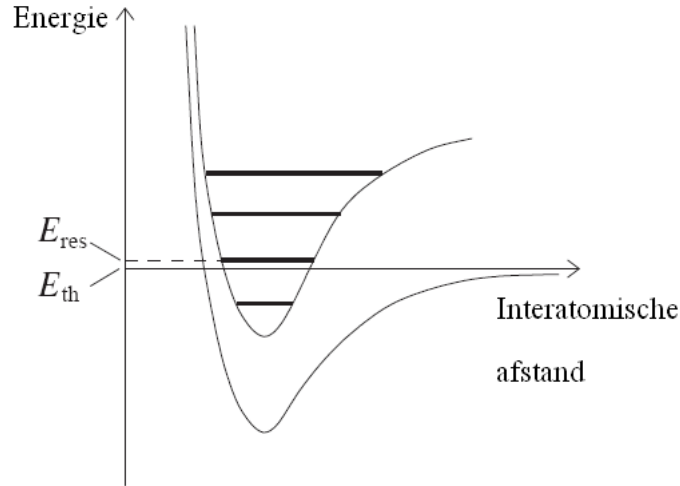
7.2.1 Feshbach resonantie

In de theorie van botsingen tussen twee deeltjes noemt men een toestand waarbij de twee deeltjes vrij zijn een open kanaal en een gebonden toestand een gesloten kanaal. Uit de theorie volgt dat een gesloten kanaal als eindtoestand van het verstrooiingsproces, waarbij de deeltjes weer ver uit elkaar gaan, verboden is omdat er dan niet voldaan wordt aan het behoud van energie. Als er nu echter een gesloten kanaal bestaat, waarvan de energie dicht bij de energie van een open kanaal ligt, kan het systeem zich tijdelijk in dit gesloten kanaal bevinden en hebben we dus een resonante toestand. Dit is voorgesteld in figuur 7.1.

Een Feshbach resonantie kan de verstrooiingseigenschappen drastisch veranderen, de verstrooiingslengte kan men in de buurt van een feshbachresonantie schrijven als:

$$a \propto \frac{C}{E - E_{res}}, \quad (7.9)$$

met E de energie van de deeltjes in het open kanaal en E_{res} de energie van het gesloten kanaal. De verstrooiingslengte kan dus sterk veranderen als de twee energieën dicht bij mekaar komen. Aangezien de energie van toestanden afhankelijk is van externe parameters, zoals een magneetveld, maakt deze resonantie het mogelijk om de effectieve interacties tussen atomen in te stellen. Deze Feshbach resonanties zijn reeds een belangrijk werktuig voor het onderzoek naar de atoomfysica in ultrakoude gassen en worden reeds veelvuldig gebruikt. In ons geval voorziet het de mogelijkheid om de koppelingsparameter te variëren door middel van een extern magnetisch veld.



Figuur 7.1: Schematische voorstelling van de potentiële energie van twee verschillende kanalen, welke een Feshbach resonantie illustreert. E_{th} is de minimum energie van het onderste kanaal zodat het open is, E_{res} is de energie van een toestand in een gesloten kanaal.

7.3 Een lithium onzuiverheid in een natrium condensaat

Het condensaat bestaat uit natrium atomen opgesloten in een anisotrope harmonische val. De val is symmetrisch in de x en de y richting, welke men de loodrechte richting noemt (aangeduid met \perp), maar niet in de z richting, welke men de parallel richting noemt (aangeduid met \parallel). We gaan ervan uit dat de natrium atomen zich in de $|F, M_F \rangle = |1, -1 \rangle$ toestand bevinden, wat belangrijk is voor de verstrooiingslengte. Als onzuiverheid wordt er een lithium atoom gebruikt, de parameters die het systeem bepalen zijn:

Na	Li
$\omega_{\parallel} = 2\pi \times 150\text{Hz}$	$\omega_{\parallel} = 2\pi \times 350\text{Hz}$
$\omega_{\perp} = 2\pi \times 50\text{Hz}$	$\omega_{\perp} = 2\pi \times 2300\text{Hz}$
$m_B = 3.8 \times 10^{-26}\text{kg}$	$m_I = 1.2 \times 10^{-26}\text{kg}$
$N = 10^5$	
$a_{BB} = 2.9\text{nm}$	$a_{IB} = 2.5 - 2.9\text{nm}$

(7.10)

De gebruikte eenheden die we doorheen de thesis hebben gebruikt zijn dan voor het specifieke systeem:

lengte	frequentie	temperatuur	massa
$\xi = 440\text{nm}$	$\omega_0 = \frac{\hbar}{m_I \xi^2} = 2\pi \times 7.1\text{Hz}$	$\frac{\hbar\omega_0}{k_B} = 440\text{nK}$	$\frac{m_B}{m_I} = 3.3$

(7.11)

Om de padintegraal numeriek te berekenen voerden we een cut-off $K_c = 1/r_0$ in, met r_0 de reikwijdte van de interatomische potentiaal. Voor een Van der Waals interactie kan men deze reikwijdte afschatten als:

$$r_0 = \left(C_6 \frac{m_B}{m_e} \right)^{1/4} a_{\text{Bohr}}, \quad (7.12)$$

waarbij m_e de elektron massa is, a_{Bohr} de Bohr straal en C_6 een dimensieloze parameter die de sterkte geeft van de interactie in atomische eenheden. In natrium is $C_6 = 1556^{7.2}$, als we dit invullen vinden we dat we voor de cut-off $K_c \approx 100$ kunnen gebruiken.

Als we de parameters invullen in de uitdrukking voor de koppelingsparameter vinden we:

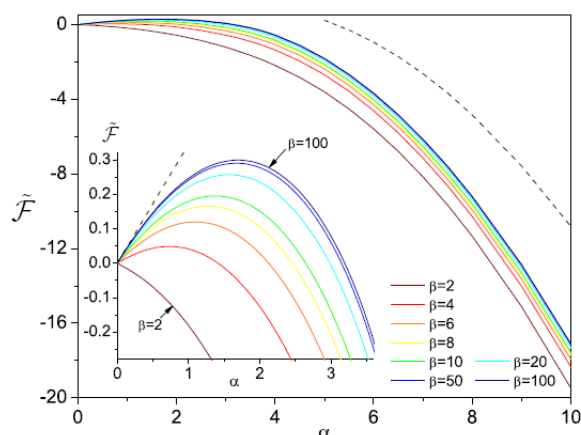
$$\alpha = 7.1 \times 10^{-3}, \quad (7.13)$$

dit is duidelijk nog niet in het sterke koppeling regime en men zal dus gebruik moeten maken van een Feshbach resonantie om in dit regime te geraken. In de literatuur is er reeds sprake van een Feshbach resonantie in natrium bij 907 G, maar deze is erg smal (1 G) en vergt een stabiliteit van 10^{-4} om a_{BB} te verlagen met een factor 10.

We kunnen ook berekenen dat de minimum waarde voor $\tilde{\beta}$ om een Bose-Einstein condensaat te hebben ongeveer 2 is, verder zal men kunnen koelen tot $\tilde{\beta} \approx 10$, dit bepaalt het temperatuursregime waarbij men zal werken.

Nu kunnen we de specifieke waardes voor de parameters invullen in de theorie van hoofdstuk 6. De vrije energie die we dan krijgen is weergegeven in figuur 7.2. We zien dat de vrije energie bijdrage van het polaron van positief naar negatief gaat bij $\alpha \approx 3.5$, zoals we in het vorige hoofdstuk opmerkten wijst dit op een fase overgang. In figuur 7.3 is de variationele parameter \tilde{M} weergegeven, welke een idee geeft van het gedrag van de effectieve massa. Voor kleine α stijgt de effectieve massa lineair, maar vanaf $\alpha \approx 3.5$ stijgt de effectieve massa veel sneller, wat weer wijst op een fase overgang. In de inset hebben we het effect van de cut-off op de effectieve massa bekeken, het blijkt dat de overgang meer uitgesproken wordt voor een grotere cut-off. In figuur

^{7.2}dit is terug te vinden in het boek C.J. Pethick & H. Smith *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases.*, Cambridge, 2002.

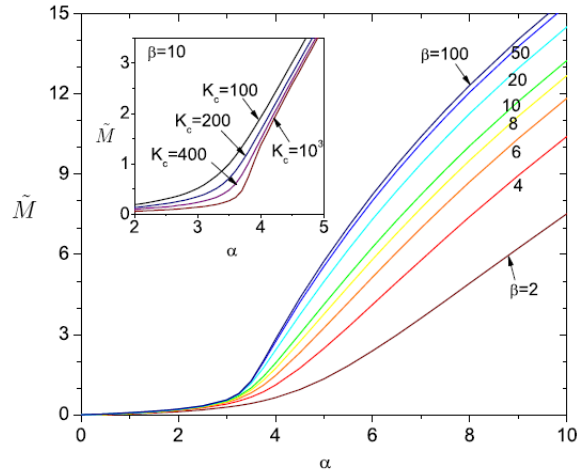


Figuur 7.2: De vrije energie voor een lithium atoom in een natrium condensaat in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen. De stippellijnen geven de limiet van zwakke en sterke koppeling.

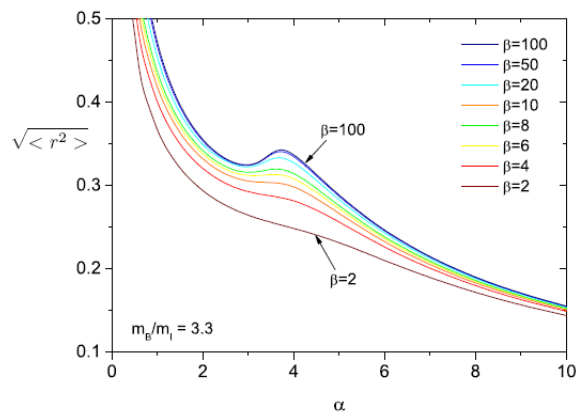
7.4 is tenslotte de grootte van het polaron weergegeven. Ook hier zien we een aanwijzing voor een fase overgang bij $\alpha \approx 3.5$. We zien een sterke daling bij zwakke koppeling, gevolgd door een bult bij $\alpha \approx 3.5$ en dan een zwakkere daling bij sterke koppeling.

7.4 Conclusie

Als we het systeem van een lithium onzuiverheid in een natrium condensaat beschouwen volgt uit de theorie dat er zich een duidelijke fase overgang voordoet bij de overgang van het regime van zwakke koppeling naar sterke koppeling bij $\alpha \approx 3.5$. Het is echter niet evident om in het regime van sterke koppeling te geraken, maar dit zou mogelijk zijn door middel van een Feshbach resonantie.



Figuur 7.3: De variationele parameter \tilde{M} voor een lithium atoom in een natrium condensaat in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen en een verschillende cut-off.



Figuur 7.4: De grootte van het polaron voor een lithium atoom in een natrium condensaat in functie van de koppelingsparameter, voor verschillende temperaturen.

8 Appendix: artikel in voorbereiding

Feynman treatment of the BEC-impurity polaron

J. Tempere^{1,2}, W. Casteels¹, M.K. Oberthaler³, E. Timmermans⁴, J.T. Devreese¹

¹ *TFVS, Universiteit Antwerpen, Groenenborgerlaan 171, B2020 Antwerpen, Belgium*

² *Lyman Laboratory of Physics, Harvard University, Cambridge MA02138, USA.*

³ *Kirchhoff-Institut für Physik, Universität Heidelberg,
Im Neuenheimer Feld 227, D-69120 Heidelberg, Germany. and*

⁴ *Theoretical Division (T-4), Los Alamos National
Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA.*

(Dated: March 1, 2009)

Abstract

The description of an impurity atom in Bose-Einstein condensate can be cast in the form of Fröhlich's polaron Hamiltonian, where the Bogoliubov excitations play the role of the phonons. An expression for the corresponding polaronic coupling strength is derived, relating the coupling strength to the scattering lengths, the trap size and the number of Bose condensed atoms. This allows to identify several approaches to reach the strong-coupling limit for the quantum gas polarons, whereas this limit was hitherto inaccessible in solids. We apply Feynman's path-integral method to calculate for all coupling strengths the polaronic shift in the free energy and the increase in the effective mass. The effect of temperature on these quantities is included in the description. We find similarities to the acoustic polaron results and indications of a transition between free polarons and self-trapping effects. The prospects, based on the current theory, of investigating the polaron physics with ultracold gases are discussed for lithium atoms in a sodium condensate.

I. INTRODUCTION

Quantum gases are used as an excellent testbed for many-body theory, and are particularly useful to investigate strong-coupling regimes or strongly correlated regimes that have remained out of reach in the solid state[1]. The current work focuses on the physics of an impurity in a Bose-Einstein condensate (BEC), as this system opens a new and promising avenue to investigate long-standing problems in polaron theory[2]. In 1952 Fröhlich, inspired by Landau’s concept of the polaron, derived a Hamiltonian that describes a charge carrier (electron, hole) interacting with its self-induced polarization, in an ionic crystal or a polar semiconductor[3, 4]. The Fröhlich polaron Hamiltonian has resisted exact analytical diagonalization since 1952 and became a laboratory to test methods of quantum field theory[2]. Tomonaga’s canonical transformation was applied to study the weak coupling regime. Bogoliubov tackled the polaron strong coupling limit with one of his canonical transformations. Feynman used his path integral formalism (and an ad-hoc variational principle) to develop a superior all coupling approximation for the polaron[5]. These studies were addressing the self-energy, the effective mass and the mobility of Fröhlich polarons. Studies of the optical absorption of a Fröhlich polaron were initiated by Evrard *et al.* [6] for strong coupling and by Gurevich *et al.* [7] for the weak coupling limit. Devreese *et al.* [8] calculated the optical absorption of the Fröhlich polaron at all coupling using Feynman path integrals.

However the largest Fröhlich polaron coupling constant established in any solid by experiment is not strong enough to exhibit the and the rich internal excitation structure of the optical absorption predicted in Ref. [8]. The possibility to tune the coupling strength in the BEC-impurity system presents a marvellous challenge and opportunity to experimentally reveal the internal excitation structure and its related resonances and scattering states “contained” in the Fröhlich field-theoretical polaron Hamiltonian. Quantum gases could therefore reveal important and subtle characteristics (eigenstates, resonances,...) of a Hamiltonian devised for a solid that cannot be realized in a solid. The observation of the spectra of the BEC-impurity Hamiltonian at large coupling would be all the more interesting in view of recent studies of the spectrum of the Fröhlich polaron Hamiltonian with Diagrammatic Quantum Monte-Carlo numerical techniques [9] and with a new strong coupling model [10] that explore the validity of the Franck-Condon principle with increasing coupling strength. Similarly, the transition between quasi-free polarons and self-trapped

polarons predicted for acoustic polarons[11] is expected to occur in a coupling regime hitherto inaccessible in the solid state. Finally, a better understanding of the intermediate and strong-coupling regimes is needed to further elucidate the role of polarons and bipolarons in unconventional pairing mechanisms for high-temperature superconductivity[12].

The Hamiltonian of an impurity in a Bose-Einstein condensate can be mapped onto the polaron Hamiltonian when the Bogoliubov approximation is valid[13, 14]. The polaronic effects comes about through the coupling of the impurity with the Bogoliubov excitations, as shown in Sec. II. We apply the path-integral formalism, valid at all values of the coupling strength, to describe the polaronic effect in a condensate in Sec. III. As a concrete example, we use the parameters for a lithium impurity in a sodium condensate, and derive an expression linking the experimental parameters to a dimensionless coupling constant analogous to the Fröhlich coupling constant for electrons in polar crystals. The polaronic energy shift, the effective mass increase and the polaron radius are studied for all values of this coupling strength and at all temperatures where the Bogoliubov approximation is valid, in Sec. IV.

II. THE POLARON HAMILTONIAN FOR AN IMPURITY IN A CONDENSATE

The Hamiltonian of a single atom, in the presence of a Bose gas is given by:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{BB}(\mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V_{IB}(\mathbf{q}) \hat{\rho}_I(\mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} \quad (1)$$

The first term represents the kinetic energy of the "impurity" atom with mass m_I . The operators $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}}$ create and annihilate a boson with mass m_B , wave number \mathbf{k} , and energy $\varepsilon_{\mathbf{k}} = (\hbar k)^2/(2m_B) - \mu$ where μ is the chemical potential. These bosons interact, and $V_{BB}(\mathbf{q})$ is the Fourier transform of the boson-boson interaction potential. The interaction between the bosonic atoms and the impurity atom is described by a potential $V_{IB}(\mathbf{q})$ coupling the boson density to the impurity density $\hat{\rho}_I(\mathbf{q})$, the Fourier transform of $\delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}})$.

Bose-Einstein condensation is realized when the single-particle density matrix has an eigenvalue $N_0 \gg 1$ comparable to the total number of bosons [17]. For a homogeneous condensate, this is expressed by the Bogoliubov shift [18] which transforms the Hamiltonian (1) into

$$\hat{H} = E_{GP} + N_0 V_{IB}(\mathbf{0}) + \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} E_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sqrt{\frac{\xi_{\mathbf{k}} N_0}{E_{\mathbf{k}}}} V_{IB}(\mathbf{k}) \hat{\rho}_I(\mathbf{k}) \left[\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right] \quad (2)$$

Here, the operators $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}}$ create resp. annihilate Bogoliubov excitations with wave number \mathbf{k} and dispersion

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} + 2N_0 V_{BB}(\mathbf{k})]} \quad (3)$$

where $\xi_{\mathbf{k}} = (\hbar k)^2/(2m_B)$. The first term in (2) represents the Gross-Pitaevskii energy [19]

$$E_{GP} = N_0 \varepsilon_0 + \frac{N_0^2}{2} V_{BB}(\mathbf{0}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} N_0 V_{BB}(\mathbf{k}) \quad (4)$$

and the second term is the interaction shift due to the impurity. For both the boson-boson interaction and the boson-impurity interaction we will assume contact pseudopotentials: $V_{BB}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_{BB} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ and $V_{IB}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_{IB} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. The interaction strengths g_{BB} and g_{IB} are related to the boson-boson scattering length a_{BB} and the boson-impurity scattering length a_{IB} , respectively, through the Lippmann-Schwinger equation. For the boson-boson interaction, the first order result $g_{BB} = 4\pi \hbar^2 a_{BB}/m_B$ will suffice. For the boson-impurity interaction, the Lippmann-Schwinger equation needs to be treated correctly up to second order to obtain valid results for the polaron problem, since as we shall see, g_{IB}^2 will appear in the expressions.

The resulting Hamiltonian (2) maps onto the Fröhlich polaron Hamiltonian [4]

$$\hat{H}_{pol} = \frac{\hat{p}^2}{2m_I} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \neq 0} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{r}}} (\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger) \quad (5)$$

with

$$\hbar \omega_{\mathbf{k}} = ck \sqrt{1 + (\xi k)^2/2} \quad (6)$$

$$V_{\mathbf{k}} = \sqrt{N_0} \left[\frac{(\xi k)^2}{(\xi k)^2 + 2} \right]^{1/4} g_{IB} \quad (7)$$

In these expressions $\xi = 1/\sqrt{8\pi a_s N_0}$ is the healing length of the Bose condensate and $c = \hbar/(\sqrt{2}m_B \xi)$ is the speed of sound in the condensate. The operator structure (expression, form..) of the BEC-impurity Hamiltonian and that of the Fröhlich polaron Hamiltonian is identical. Depending on the analytical form of the scalar functions multiplying the field operators, the Fröhlich polaron Hamiltonian, originally devised to describe the electron/hole - longitudinal optical phonon interaction, can depict as well the acousto-polaron[11], the piezo-polaron[15], the ripplon-polaron [16], etc... However, a formalism/method that diagonalizes the Fröhlich Hamiltonian at all coupling, does so for all those different types of polarons, including the BEC-impurity polaron.

This mapping of the BEC-impurity problem onto the Fröhlich Hamiltonian, and the resulting possibility of polaronic self-localization of an impurity in a condensate, has been the subject of recent theoretical investigations at strong coupling [13, 14], with the Lee-Low-Pines scheme [20]. For small polarons in an optical lattice, a perturbative study exists [21]. As is also known from the study of the polaronic problem for slow electrons in a polar crystal, these approximations give qualitatively different results for different regimes of coupling strength. This discrepancy between weak-coupling and strong-coupling behavior is even more pronounced in the case of an impurity in a condensate. In this work, we present a calculation valid for all coupling strength, based on the Feynman-Jensen variational scheme first successfully applied by Feynman [5] to slow electrons interacting with optical phonons in polar crystals. As discussed below, the present system will have more similarities to acoustic polarons than with the polarons considered by Feynman.

III. JENSEN-FEYNMAN FREE ENERGY

A. General treatment

The calculation of the free energy F of the polaron is based on the Feynman-Jensen variational inequality

$$F \leq F_0 + \frac{1}{\hbar\beta} \langle \mathcal{S} - \mathcal{S}_0 \rangle_{\mathcal{S}_0} \quad (8)$$

where \mathcal{S} is the action functional of the real system described by the Hamiltonian (5), and \mathcal{S}_0 is the action functional of a variational model system with free energy F_0 . For the polaron Hamiltonian (5) the action functional \mathcal{S} is given by

$$\mathcal{S} = \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) d\tau - \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{2\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \mathcal{G}(\mathbf{k}, |\tau - \sigma|) e^{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]}. \quad (9)$$

with $\mathcal{G}(\mathbf{k}, u)$ the Bogoliubov excitation Green's function, given by

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, u) = \frac{\cosh[\omega_{\mathbf{k}}(u - \hbar\beta/2)]}{\sinh(\hbar\beta\omega_{\mathbf{k}}/2)}, \quad (10)$$

The action functional (9) is obtained by integrating out analytically the oscillator degrees of freedom corresponding to the Bogoliubov excitations. This gives rise to a retarded interaction (proportional to $e^{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]}$), mediated by the Bogoliubov-excitation Green's function, and with coupling strength $|V_{\mathbf{k}}|^2 / (2\hbar)$.

The real system is modelled by a variational trial system with free energy F_0 described by the action functional

$$\mathcal{S}_0 = \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) d\tau + \frac{MW^3}{8} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\sigma \frac{\cosh [W (|\tau - \sigma| - \hbar\beta/2)]}{\sinh (\beta\hbar W/2)} [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]^2. \quad (11)$$

The model system corresponds to a mass m_I that is coupled by a spring with spring constant MW^2 to a "Bogoliubov" mass M . Both M and W are variational parameters. The formalism is valid for all temperatures T entering through $\beta = 1/(k_B T)$. The expectation value in the inequality is evaluated in the model system. This model system is chosen partly because the expectation values can be calculated analytically in it. For more details on the formalism, we refer to Ref. [5, 22]:

$$\begin{aligned} F \leq & \frac{3}{\beta} \left\{ \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta\hbar\Omega}{2} \right) \right] - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta\hbar W}{2} \right) \right] \right\} \\ & - \frac{3}{2\beta} \frac{M}{m_I + M} \left[\frac{\hbar\beta\Omega}{2} \coth \left(\frac{\beta\hbar\Omega}{2} \right) - 1 \right] \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} du \left(1 - \frac{u}{\hbar\beta} \right) \mathcal{G}(\mathbf{k}, u) \mathcal{M}_{M,\Omega}(\mathbf{k}, u). \end{aligned} \quad (12)$$

Here $\Omega = W\sqrt{1 + M/m_I}$, and the memory function is given by

$$\mathcal{M}_{M,\Omega}(\mathbf{k}, u) = \exp \left[-\frac{\hbar k^2}{2(m + M)} \left(u - \frac{u^2}{\hbar\beta} - \frac{M \cosh [\Omega(\hbar\beta/2)] - \cosh [\Omega(\hbar\beta/2 - u)]}{\Omega \sinh(\beta\hbar\Omega/2)} \right) \right]. \quad (13)$$

Rather than choosing W, M as variational parameters, we can choose Ω, M as variational parameters.

B. BEC-impurity

Care should be taken when we substitute the interaction amplitude (7) into these expressions. Since $|V_{\mathbf{k}}|^2 \propto g_{IB}^2$, we need to solve the Lippmann-Schwinger equation up to *second* order to obtain the link between g_{IB} and a_{IB} correctly; we find

$$\frac{2\pi\hbar^2 a_{IB}}{m_r} = g_{IB} - g_{IB}^2 \sum_{\mathbf{k}' \neq 0} \frac{2m_r}{(\hbar k')^2}, \quad (14)$$

where m_r is the relative mass ($m_r^{-1} = m_B^{-1} + m_I^{-1}$). From this, we find that the term $N_0 V_{IB}(\mathbf{0}) = N_0 g_{IB}$ in (2) must also contribute a renormalization factor since

$$N_0 g_{IB} \rightarrow N_0 \frac{2\pi \hbar^2 a_{IB}}{m_r} + g_{IB}^2 \sum_{\mathbf{k}' \neq 0} \frac{2m_r}{(\hbar k')^2}. \quad (15)$$

Substituting (7) and (6) into (12) then yields

$$\begin{aligned} F \leq & \frac{3}{\beta} \left\{ \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta \Omega}{2} \right) \right] - \ln \left[2 \sinh \left(\frac{\beta \Omega}{2\sqrt{1+M}} \right) \right] \right\} \\ & - \frac{3}{2\beta} \frac{M}{1+M} \left[\frac{\beta \Omega}{2} \coth \left(\frac{\beta \Omega}{2} \right) - 1 \right] \\ & + \alpha \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right)^2 \int_0^\infty \frac{dk}{4\pi} \left[\left(\frac{2\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B} \right) - \frac{k^3}{\sqrt{2+k^2}} \int_0^{\beta/2} \mathcal{G}(k, u) \mathcal{M}(k, u) du \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

In this expression,

$$\alpha = a_{IB}^2 / (a_{BB} \xi) \quad (17)$$

is the polaronic coupling strength. In this expression, we use polaronic units, so that $\hbar = m_I = \xi = 1$. That means the free energy is in units $\hbar^2 / (m_I \xi^2)$, so that $\beta = \hbar^2 / (m_I \xi^2 k_B T)$ and $\tilde{m}_B = m_B / m_I$. The integration variables k, u and the variational parameters M, Ω in (16) are dimensionless. In these units, we find after substitution of (7) and (6), that the Green's function is given by

$$\mathcal{G}(k, u) = \frac{\cosh [k\sqrt{k^2 + 2}(2u - \beta) / (4\tilde{m}_B)]}{\sinh [\beta k\sqrt{k^2 + 2} / (4\tilde{m}_B)]},$$

and the memory function by

$$\mathcal{M}(k, u) = \exp \left[-\frac{k^2}{2(1+M)} \left(\frac{u(\beta - u)}{\beta} + M \frac{\cosh [\Omega(\beta/2)] - \cosh [\Omega(\beta/2 - u)]}{\Omega \sinh(\beta\Omega/2)} \right) \right]. \quad (18)$$

The first term of the integrand of the k -integral in (16) is due to renormalization factor which arises when we relate g_{IB} to the boson-impurity scattering length. This term is independent of the variational parameters M and Ω and does not influence the optimization of the variational parameters. Note that, although these formulae are derived for any temperature (any β), the mapping onto the polaron Hamiltonian is only valid for temperatures below the critical temperature, and low enough so that the number of Bogoliubov excitations can be neglected with respect to the number of atoms in the condensate, so that (2) gives a good description of the quantum gas. In the discussion, we will look at realistic experimental values for β and other parameters.

C. Weak and strong coupling limits

From the central result (16), we can retrieve both the weak-coupling and the strong-coupling results by a judicious choice of variational parameters, or rather variational trial actions. The weak-coupling limit is retrieved by taking the limit $M \rightarrow 0$ in the Jensen-Feynman treatment, which corresponds to a the trial action

$$\mathcal{S}_0^{weak} = \int_0^{\hbar\beta} \frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) d\tau \quad (19)$$

of a free particle, as pointed out in the original work by Feynman [5]. In the limit of zero temperature, this corresponds exactly to the second-order perturbation result $E^{weak}(\alpha)$; we find

$$E^{weak} = \alpha \frac{(1 + \tilde{m}_B)^2}{\tilde{m}_B} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq \left[\frac{1}{1 + \tilde{m}_B} - \sqrt{\frac{q^2}{q^2 + 2} \frac{q}{\tilde{m}_B q + \sqrt{q^2 + 2}}} \right] \quad (20)$$

Note that the variational energy becomes independent of Ω in the limit $M \rightarrow 0$. The energy grows linearly with α , and the proportionality constant depends on m_B :

$$E_{pol}^{weak}(\alpha) = \begin{cases} \alpha/(\sqrt{2}\pi) & \text{for } m_B \rightarrow \infty \\ 4\sqrt{2}\alpha/(3\pi) & \text{for } m_B \rightarrow 1 \\ \alpha/(\sqrt{2}m_B) & \text{for } m_B \rightarrow 0 \end{cases} \quad (21)$$

The strong-coupling limit is retrieved by taking the limit $M \rightarrow \infty$ in the Jensen-Feynman treatment. In this limit, the variational particle with mass $M \rightarrow \infty$ is fixed in place, and we get a particle attached by a spring to a fixed point rather than to a mobile variational mass. The resulting trial action for strong coupling is[5]

$$\mathcal{S}_0^{strong} = \int_0^{\hbar\beta} \left(\frac{m_I}{2} \dot{r}^2(\tau) + \frac{m_I \Omega^2}{2} r^2(\tau) \right) d\tau.$$

relating the strong-coupling limit to the variational approach of Landau and Pekar[23] for the polaron problem, based on a Gaussian variational wave function. The variational energy becomes

$$E^{strong} \leq \frac{3}{4}\Omega + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \alpha \left(\frac{\tilde{m}_B + 1}{\tilde{m}_B} \right)^2 \int_0^\infty \frac{dk}{4\pi} \left[\left(\frac{2\tilde{m}_B}{1 + \tilde{m}_B} \right) - \frac{k^3}{\sqrt{2 + k^2}} \int_0^{\beta/2} \mathcal{G}(k, u) \mathcal{M}(k, u) du \right] \quad (22)$$

Care must be taken in with the limit $\beta \rightarrow \infty$: since the convergence of $\mathcal{G}(k, u)$ to its $\beta \rightarrow \infty$ limit is not uniform the limit can not be interchanged with the integration.

IV. RESULTS AND DISCUSSION

A. Experimental realization

Before we turn to the results, it is useful to find typical experimental values of the system parameters. Consider a sodium condensate of $N_0 = 10^5$ atoms in a parabolic trap with trapping frequencies $\omega_{//} = 2\pi \cdot 50$ Hz and $\omega_{\perp} = 2\pi \cdot 150$ Hz. As triplet scattering length for sodium in the $|F, M_F\rangle = |1, -1\rangle$ hyperfine state, we use $a_{BB} = 2.9$ nm. The condensate is suitably described by the Thomas-Fermi (TF) approximation. In our calculations we have assumed spatial homogeneity, and as long as the polaronic effects are restricted to a range considerably smaller than the TF radius (9.5 μm), we can use the density at the center of the trap as the density of the condensate in our calculations, $n_0 = 7 \times 10^{13}$ cm^{-3} . From the above derivation, we see that the healing length is the relevant length-scale for the polaronic effect, and in our example it is $\xi = 440$ nm at the center of the trap, indeed smaller than the TF radius. Using $\xi = 1/\sqrt{8\pi n_0 a_{BB}}$ and the Thomas-Fermi expression for n_0 (the density at the trap center) in the definition (17) of the coupling constant, we find the useful relation

$$\alpha = 15^{1/5} \left(\frac{N_0 a_{BB}}{\bar{a}_{HO}} \right)^{1/5} \frac{a_{IB}^2}{a_{BB} \bar{a}_{HO}} \quad (23)$$

expressing the polaronic coupling constant as a function of the number of condensate atoms N_0 , the geometrical average trap length \bar{a}_{HO} and the s -wave scattering lengths.

For the impurity, we consider a lithium atom, so that

$$\tilde{m}_B = m_B/m_I = 3.3 \quad (24)$$

Using $a_{IB} = 2.7$ nm [24] as the lithium-sodium scattering length, α is of the order of 0.01. For these values, the weak-coupling expression (20) is suitable. To increase α , several strategies are possible. On the one hand, one can increase a_{IB}/a_{BB} using a Feshbach resonance to increase a_{IB} or decrease a_{BB} . On the other hand, a_{IB}/\bar{a}_{HO} can be increased by tightening the condensate trap. The remaining factor in expression (23) varies slowly as a function of the TF parameter $N_0 a_{BB}/\bar{a}_{HO}$.

We look in particular at two strategies for increasing α in the case of lithium impurities in a sodium condensate. On the one hand, one can try to reduce $a_{BB} \rightarrow 0$ using the sodium Feshbach resonance at 907 G. The tunability of a_{BB} is here limited by the magnetic field stability (due to the narrowness of the resonance); we expect a factor of 10 increase in α is realistic. On the other hand, one can try to increase a_{IB} using a sodium-lithium resonance (at 796 G or 1186 G). In this strategy, the limiting factor to the tunability of a_{IB} is the lifetime; we expect that increases in α ($\propto a_{IB}^2$) up to a factor 1000 are still attainable. This leads to a maximal α of the order of 10, which as we shall see, is already well in the strong-coupling regime. The main loss channel is the three-body recombination process $\text{Li}+\text{Na}+\text{Na}$, for which the loss coefficient is not yet known (at large a_{IB}).

The energy scale $\hbar^2/(m_I\xi^2)$ corresponds to a frequency of $2\pi \cdot 7.1$ kHz or a temperature of 350 nK. With this choice,

$$\beta = \frac{350 \text{ nK}}{T \text{ (nK)}} \quad (25)$$

The (ideal gas) critical temperature for the sodium condensate is 220 nK, or $\beta = 1.6$. As the lowest temperature we estimate $0.5 T_\mu$ where $T_\mu = \mu/k_B = 53$ nK. This corresponds to $\beta = 13$, so that the experimentally relevant window for this parameter is $\beta \in [1.6, 13]$.

The Bogoliubov dispersion at low k is similar to that of acoustic phonons rather than optical phonons. For the acoustic polaron, it is known that the variational parameters -especially the polaron mass- depend on the value of a cut-off in the K_c integral[11]. For phonons in solids, this cut-off is related to the edge of the Brillouin zone. In the case of dilute quantum gases, a natural cut-off scale arises from the range r_0 of the interatomic potential: on scales smaller than this the interaction amplitude cannot be represented any more by expression (7) and should be suppressed. The range of the interatomic potential is estimated through the Van der Waals radius $r_0 = 4.75$ nm, related by $r_0 = (C_6 m/m_e)^{1/4} a_{Bohr}$ to the Van der Waals coefficient $C_6 = 1556$ for the sodium interatomic interaction[25]. In units of ξ^{-1} , this places the cut-off at $K_c \approx 100$ for the parameters listed in this section.

B. Free energy and critical coupling strength

Figure 1 shows the results for the free energy as a function of α , using a wave number cut-off at $K_c = 100$, for different values of β , ranging from $\beta = 100$ (where the $T \rightarrow 0$ limit is reached to within the order of 1%) to $\beta = 2$, where thermal depletion of the condensate

starts to be appreciable. Standard cooling schemes, as mentioned, can cool down to roughly $\beta = 10$. The dashed line shows the weak-coupling perturbative result valid for temperature zero (and without any wave number cut-off). As predicted by Timmermans and co-workers, at small $\alpha \ll 1$ and $\beta \gg 1$ the polaronic contribution to the energy is positive. It reaches a maximum around $\alpha = 1.5 - 2.0$ and then decreases. The polaronic energy contribution becomes negative (indicative of a transition from an unbound state to a self-trapped state) at a critical coupling strength $\alpha_c \simeq 3.23$ for $T \rightarrow 0$. This critical value goes to zero for increasing temperatures. The perturbative solution is seen to fit well at low coupling. At larger coupling, the dashed curve indicates the strong-coupling variational result (22): it is significantly larger than the result of the full variation with M and Ω free parameters, indicating that a Gaussian wave function may not be as suitable as it is for polarons in the solid state. We emphasize that the polaronic energy calculated here is the contribution from (5) and does not contain the terms $E_{GP} + N_0 V_{IB}(\mathbf{0})$ which have a known dependence on the various tunable parameters N_0, a_{IB} and a_{BB} , and which complicate the experimental determination of the polaronic energy contribution. To observe polaronic effects, it may be more straightforward to measure the shift in effective mass of the impurity.

C. Effective mass increase

The effective polaron mass m_{pol} can be derived from the path-integral propagation of a particle from $r(0)$ to a nearby point $r(\tau) = r(0) + v\tau$ by casting the resulting transition amplitude in the form $\exp\{-m_{pol}v^2\tau/2\}$. Feynman notes that this procedure gives a value for m_{pol} which is always within a few percent of $1 + M$ with M the variationally optimal mass of the trial model. Figure 2 shows the result for M as a function of α , for different values of the temperature. For small values of the coupling strength, the mass increases linearly with α as predicted from perturbation theory. However, near $\alpha \approx 3.5$, the behavior changes and the mass increases rapidly.

The low-energy Bogoliubov excitations are sound waves, with a dispersion qualitatively similar to acoustic phonons. The effective mass of acoustic polarons – electrons interacting with acoustic phonons – shows a jump of several orders of magnitude in the effective mass [11] above a critical coupling strength. In the present case we also note a faster increase in the mass above a critical coupling strength, even though the interaction amplitude is

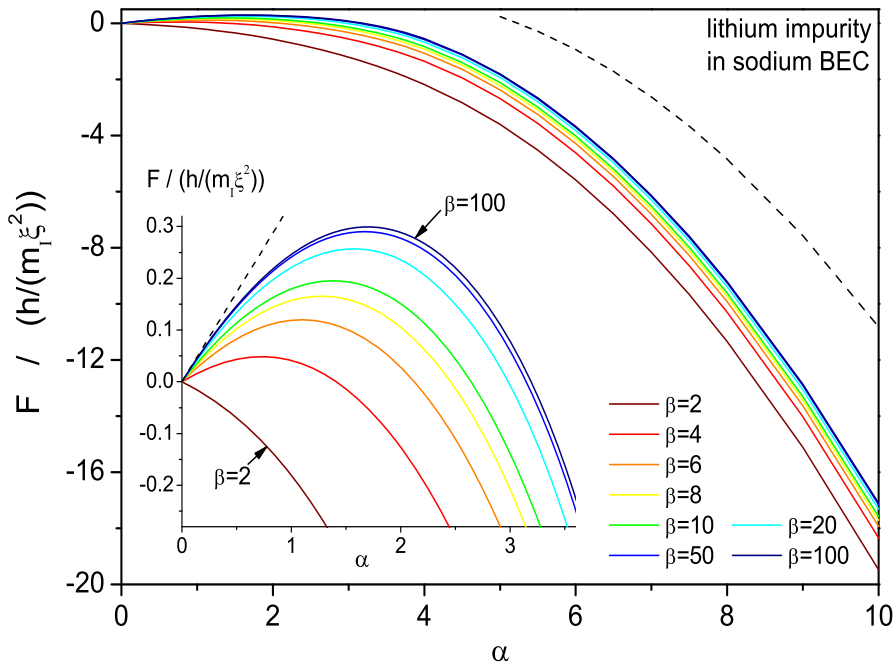


FIG. 1: (Color online) The polaronic contribution (16) to the free energy of an impurity in a condensate is shown as a function of the coupling constant α , for different values of the temperature. From top to bottom, these are $\beta = 100, 50, 20, 10, 8, 6, 4, 2$, corresponding in our example to $T = 3.5, 7, 18, 35, 44, 58, 88$ and 175 nK, respectively. The dashed curve shows the strong-coupling Pekar approximation. The inset zooms in on the small α region: the dashed line in inset shows the second order perturbation result.

different from that between acoustic phonons and electrons. In the dilute atomic gas, the transition is much less dramatic, and becomes smoother as temperature increases. For acoustic polarons, it is also predicted that the sharpness of the transition depends strongly on the cutoff: above a critical value of K_c a discontinuity appears in the mass as a function of α . So it is worthwhile to study the dependence of M on the value of a cut-off to the k integrations in (16) also in the present case. We find that increasing the cutoff sharpens the transition (as can be seen in the inset of Fig. 2), but no discontinuity arises as it does for the acoustic polaron. The difference is due to the fact that although the Bogoliubov excitation dispersion and the interaction amplitude show a similar k -dependence as in the case of acoustic polarons, this is only true in the limit $k \ll 1$, and large deviations already occur

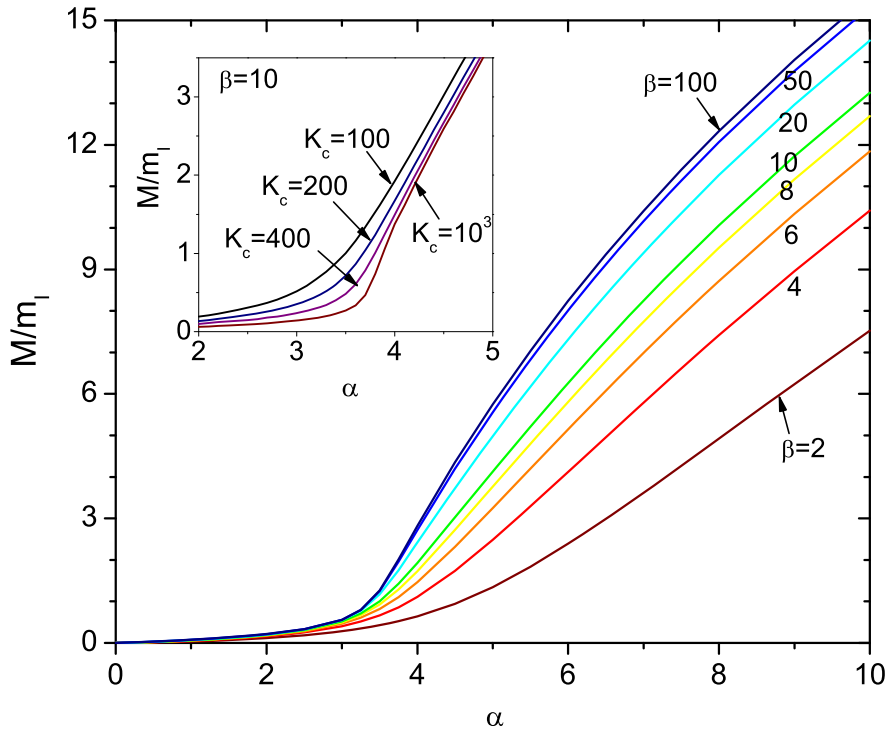


FIG. 2: (Color online) The variational mass parameter M is shown as a function of α . The effective polaron mass is to a good approximation given by $m_{pol} = m_I(1 + M/m_I)$. The curves correspond to different temperatures ($\beta = 100, 50, 20, 10, 8, 6, 4, 2$, from top to bottom), at cut-off $K_c = 100$. The inset shows the effect of cutoff ($K_c = 100, 200, 400, 1000$, from top to bottom), at $\beta = 10$.

for $k \approx 1$, the relevant length scale of the problem. Yet even though the transition is not as abrupt as for acoustic polarons, it is possible to distinguish two regimes. In conjunction with the crossover from positive to negative values of the free energy, this is again indicative of a transition between an quasi-free (unbound) impurity and self-trapping for the impurity.

D. Polaron radius

The second variational parameter, Ω , is linked to the polaron radius. Within the model system described by the action functional \mathcal{S}_0 , expression (11), the expectation value of the square of the relative coordinate for the impurity – boson mass system is given by

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{2\Omega} \frac{M}{1+M} \coth\left(\frac{\beta\Omega}{2}\right) \quad (26)$$

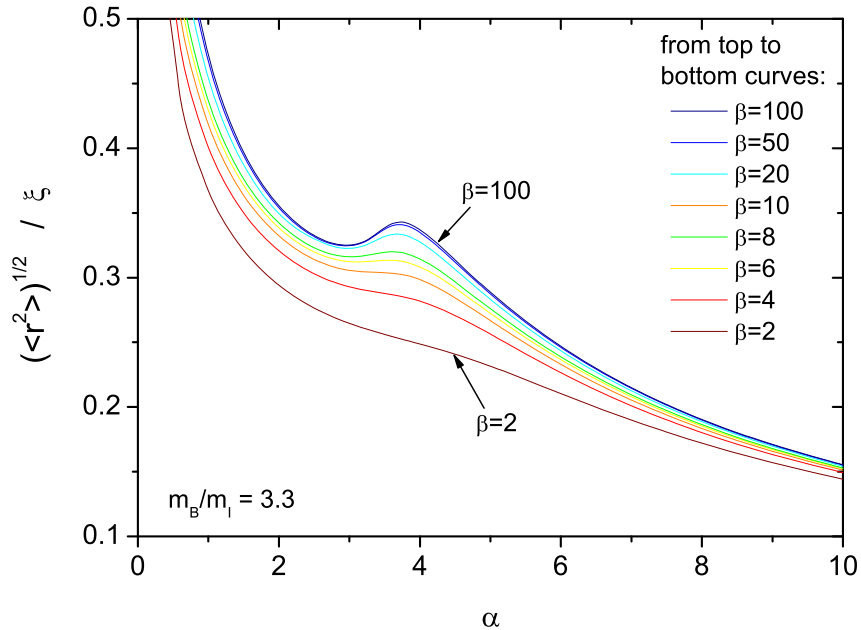


FIG. 3: (Color online) The polaron radius in units of the healing length is plotted as a function of the coupling constant α , for different temperatures. From top to bottom, $\beta = 100, 50, 20, 10, 8, 6, 4, 2$. Around $\alpha \approx 3.5$ nonmonotonous behavior develops as a function of α when the temperature is reduced.

The square root of this is a measure of the localization length of the impurity wave function. In strong coupling, this expectation value converges to the expectation value with respect to the variational wave function formulated by Landau and Pekar[23].

Fig. (3) shows the polaron radius $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$ as a function of the coupling strength, for different values of β , at a cut-off $K_c = 100$. As the coupling strength is increased, the polaron radius decreases, indicating a stronger confinement of the impurity wave function. In particular the large α behavior might still depend on the cut-off, although a $1/\alpha$ dependence is expected independently of K_c . Near $\alpha \approx 3.5$, we find that a bump develops and the behavior of the polaron size as a function of α becomes non-monotonic.

V. CONCLUSION

When the Bogoliubov approximation applies, the Hamiltonian describing the impurity in a condensate can be cast in the form of the Fröhlich Hamiltonian. The physics becomes

similar to that of a polaron, where the Bogoliubov excitations have taken the role of the phonons and the interaction strength is related to the impurity-boson and boson-boson scattering lengths. The most accurate description of polaron physics is given by Feynman's treatment, which moreover allows to study the temperature dependence of observables such as the effective mass and the free energy. We have applied the Jensen-Feynman path-integral calculation to the case of the impurity in a condensate and derived expression (16) for the free energy. Both in the free energy and the effective mass, a critical range of the coupling strength $\alpha \approx 3.5$ can be identified where the system crosses over from the weak-coupling to the strong-coupling regime. These regimes show a qualitatively different behavior in the effective mass and free energy. The sharp increase in the the effective mass in the strong-coupling regime hints at a transition from an quasi-free state to a self-trapped state similar to that of acoustic polarons. It has been pointed out that a the polaron self-trapping transition is impossible to realize in most semiconductors and III-V compounds, even in alkali halides. However, the present results indicate that it might be attainable in ultracold gases. For this purpose, we investigated the experimentally relevant values of the system parameters, and derived a useful expression (23) relating α to the various parameters in the case of a condensate in the Thomas-Fermi regime. This opens up the prospect to reach and investigate the strong-coupling regime in ultracold gases, whereas this regime has hitherto be inaccessible in the solid state.

Acknowledgments

This work was supported by FWO-V projects G.0115.06, G.0356.06, G.0180.09N, G.0370.09N, the WOG WO.033.09N (Belgium), and INTAS Project no. 05-104-7656. J.T. gratefully acknowledges support of the Special Research Fund of the University of Antwerp, BOF NOI UA 2004.

-
- [1] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
[2] J. T. Devreese, A.S. Alexandrov, to appear in *Reports on Progress in Physics* (2009), arXiv:0904.3682.

- [3] L.D. Landau and S. I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **18**, 419 (1948).
- [4] H. Fröhlich, Adv. Phys. **3**, 325 (1954).
- [5] R.P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 660 (1955).
- [6] E. Kartheuser, E. Evrard, and J. Devreese, Phys. Rev. Lett. **22**, 94 (1969).
- [7] V.L. Gurevich, I. G. Lang, and Yu. A. Firsov, Sov. Phys. Solid St. **4**, 918 (1962).
- [8] J. Devreese, J. De Sitter, and M. Goovaerts, Phys. Rev. B **5**, 2367 (1972).
- [9] A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **91**, 236401 (2003).
- [10] G. De Filippis, V. Cataudella, A. S. Mishchenko, C. A. Perroni, J. T. Devreese, Phys. Rev. Lett. **96**, 136405 (2006).
- [11] F.M. Peeters and J.T. Devreese, Phys. Rev. B **32**, 3515 (1985).
- [12] A.S. Alexandrov, Phys. Rev. B **77**, 094502 (2008); A.S. Alexandrov, in *Polarons in Advanced Materials* (Springer Series in Materials Science, vol.**103** (2007), pp. 257-310, and references therein.
- [13] F. M. Cucchietti and E. Timmermans, Phys. Rev. Lett. **96**, 210401 (2006).
- [14] K. Sacha and E. Timmermans, Phys. Rev. A **73**, 063604 (2006).
- [15] G.D. Mahan, in *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* (ed. J. T. Devreese, North-Holland, Amsterdam, 1972), p. 553.
- [16] Jackson, S. A., and P. M. Platzman, Phys. Rev. B **24**, 499 (1981); G.E. Marques, N. Studart, Phys. Rev. B **39**, 4133 (1989); J. Tempere, S.N. Klimin, I.F. Silvera, J.T. Devreese, Eur. Phys. J. B **32**, 329–338 (2003).
- [17] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 - 584 (1956).
- [18] N.N. Bogoliubov, J. Phys. (USSR) **11**, 23 (1947).
- [19] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation* (Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, UK), 2003.
- [20] B. Huang and S. Wan, Arxiv preprint arXiv:0811.3881 (2008).
- [21] M. Bruderer, A. Klein, S.R. Clark, D. Jaksch, Physical Review A **76**, 011605 (2007).
- [22] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures* (Addison-Wesley Publ. Co., Reading MA, USA), 1990.
- [23] L.D. Landau and S.I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **16**, 341 (1946).
- [24] B. Apagyi and D. Schumayer, Eur. Phys. J. B **45**, 55 (2005).

- [25] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose-Einstein condensation in dilute gases* (Cambridge University Press, Cambridge, UK), 2001.