ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII

Juan Herrera Mateos

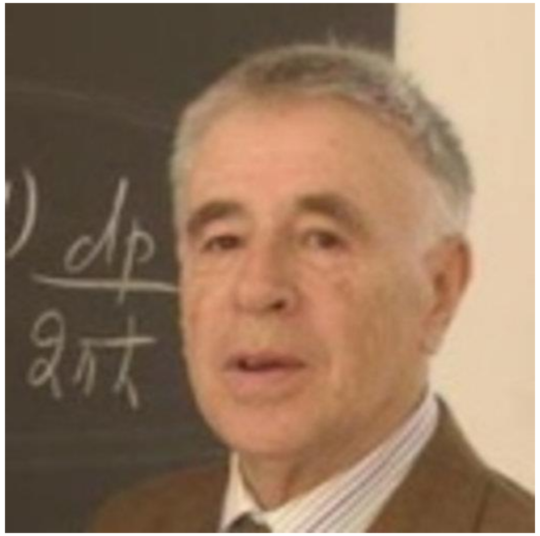
Fenómenos Colectivos en Sólidos 1C2021. Prof. Dr. Pablo Tamborenea

INTRODUCCIÓN

- En esta charla mostraremos cómo describir el estado fundamental de un sistema de bosones interactuantes.

- La ecuación que lo rige fue desarrollada por Eugene Gross y Lev Pitaevskii de manera independiente hacia 1961.

Eugene P. Gross
(1926-1991)



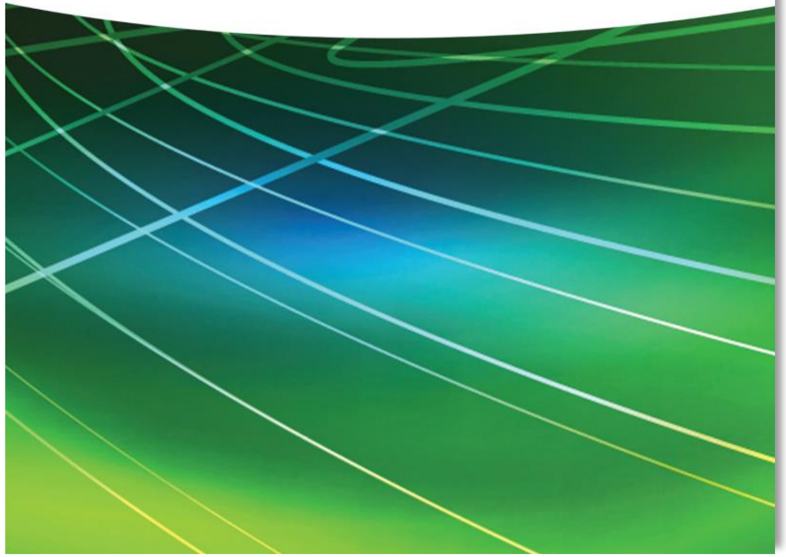
Lev Pitaevskii
(1933-)

WILEY-VCH

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and
Franck Laloë

Quantum Mechanics

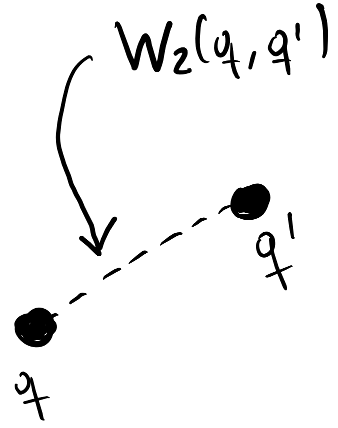
Volume III: Fermions, Bosons, Photons, Correlations, and Entanglement



INTRODUCCIÓN

- Comenzamos definiendo el hamiltoniano que describe el problema:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_{\text{ext}} + \widehat{W}_{\text{int}}$$



$\widehat{H}_0 = \sum_q K_0(q)$ $\quad K_0(q) = \frac{\mathbf{P}_q^2}{2m}$ *Energía cinética (op. de un cuerpo)*

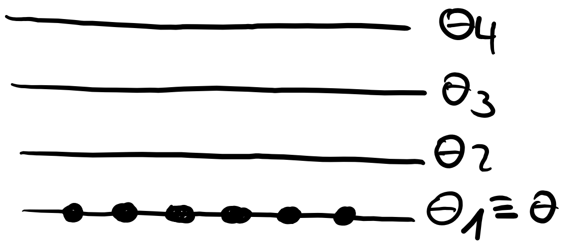
$\widehat{V}_{\text{ext}} = \sum_{q=1}^{N} V_1(\mathbf{R}_q)$ *Potencial externo (op. de un cuerpo)*

$\widehat{W}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{q \neq q' = 1}^{N} W_2(\mathbf{R}_q, \mathbf{R}_{q'})$ *Energía potencial de interacción (op. de dos cuerpos)*

- Si tomamos un estado normalizado $|\theta>$, el cual tiene un operador de creación asociado a_θ, entonces el **ket variacional** de N partículas está definido según:

$$\widetilde{|\Psi\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[a_\theta^\dagger\right]^N |0\rangle$$

$\{|\theta_k\rangle\}$ $\;|\theta_1\rangle = |\theta\rangle$ $\qquad \widetilde{|\Psi\rangle} = |n_1 = N, n_2 = 0, n_3 = 0, \ldots\rangle$



PRINCIPIO VARIACIONAL

- Vamos a variar el ket |θ> y consecuentemente el ket variacional de tal manera que minimicemos la energía media

$$\widetilde{E} = \widetilde{\langle \Psi} | \widehat{H} | \widetilde{\Psi \rangle}$$

- Trabajamos en la representación de posición: $\theta(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} \, | \theta \rangle$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \theta(\mathbf{r}_1)\ \theta(\mathbf{r}_2) \ldots \theta(\mathbf{r}_N)$$

- En ella los operadores que escribimos anteriormente toman la forma:

$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\mathbf{r}_q}$

$$\left\langle \widehat{H}_0 \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{q=1}^{N} \int \mathrm{d}^3 r_1 \ldots \int \mathrm{d}^3 r_q \ldots \int \mathrm{d}^3 r_N$$
$$\times\, \theta^*(\mathbf{r}_1) \ldots \theta^*(\mathbf{r}_q) \ldots \theta^*(\mathbf{r}_N) \times \theta(\mathbf{r}_1) \ldots \Delta\theta(\mathbf{r}_q) \ldots \theta(\mathbf{r}_N)$$

$$\left\langle \widehat{H}_0 \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} N \int \mathrm{d}^3 r\ \theta^*(\mathbf{r}) \Delta\theta(\mathbf{r})$$

PRINCIPIO VARIACIONAL

- En la representación de posición los operadores que escribimos anteriormente toman la forma:

$$\left\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \right\rangle = N \int \mathrm{d}^3 r \ \theta^*(\mathbf{r}) \ V_1(\mathbf{r}) \ \theta(\mathbf{r})$$

$$\left\langle \widehat{W}_2 \right\rangle = \frac{N\,(N-1)}{2} \int \mathrm{d}^3 r \int \mathrm{d}^3 r' \ \theta^*(\mathbf{r})\theta^*(\mathbf{r}') \ W_2\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right) \ \theta(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r}')$$

$N=3$

Hay $\frac{3.2}{2}$ pares de interacción

- La **energía media variacional** es la suma de los tres términos:

$$\widetilde{E} = \left\langle \widehat{H}_0 \right\rangle + \left\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \right\rangle + \left\langle \widehat{W}_2 \right\rangle$$

- Si variamos el vector de estado en una dada cantidad infinitesimal, la misma deberá ser tal que cumpla el vínculo en la normalización. Para imponer este vínculo recurriremos al método de los multiplicadores de Lagrange:

$$\theta(\mathbf{r}) \Rightarrow \theta(\mathbf{r}) + e^{i\chi} \ \delta f(\mathbf{r})$$

$$\widetilde{F} = \widetilde{E} - \mu \int \mathrm{d}^3 r \ \theta^*(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r})$$

PRINCIPIO VARIACIONAL

$$\theta(\mathbf{r}) \Rightarrow \theta(\mathbf{r}) + e^{i\chi}\,\delta f(\mathbf{r}) \longrightarrow \delta\theta$$

$$\widetilde{F} = \widetilde{E} - \mu \int \mathrm{d}^3 r\ \theta^*(\mathbf{r})\theta(\mathbf{r})$$

- Vamos entonces a minimizar la variación de la función F notando que la variación de la energía media variacional tiene cuatro contribuciones. Por ejemplo:

$$\left\langle \widehat{H}_0 \right\rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} N \int \mathrm{d}^3 r\ \theta^*(\mathbf{r})\Delta\theta(\mathbf{r}) \longleftarrow G(\theta^*, \nabla\theta)$$

$$\delta\left\langle \widehat{H}_0 \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} N \int \mathrm{d}^3 r\ \Big[\underbrace{e^{-i\chi}\,\delta f^*(\mathbf{r})\ \Delta\theta(\mathbf{r})}_{\frac{\partial G}{\partial\theta^*}\delta\theta^*} + \underbrace{e^{i\chi}\,\theta^*(\mathbf{r})\ \Delta\delta f(\mathbf{r})}_{\frac{\partial G}{\partial(\Delta\theta)}\delta\Delta\theta = \frac{\partial G}{\partial(\Delta\theta)}\Delta\delta\theta}\Big]$$

- Lo importante es notar que en cada una de ellas aparecen números multiplicados por exponenciales complejas:

$$\delta\widetilde{F} = \delta c_1 e^{-i\chi} + \delta c_2 e^{i\chi}$$

PRINCIPIO VARIACIONAL

- Por construcción sabemos que χ es real. Para extremar la cantidad F debemos pedir que su variación se anule:

$$\delta\widetilde{F} = \delta c_1 e^{-i\chi} + \delta c_2 e^{i\chi}$$

$$\left.\begin{array}{l} \chi = 0 \implies \delta\widetilde{F} = 0 = \delta c_1 + \delta c_2 \\ \chi = \pi/2 \implies \delta F = 0 = i(-\delta c_1 + \delta c_2) \iff \delta c_1 - \delta c_2 = 0 \end{array}\right\} \implies \begin{array}{l} \delta c_1 = 0 \\ \delta c_2 = 0 \end{array}$$

- Podemos variar entonces indistintamente la parte real o la imaginaria de θ. Elegimos entonces que sólo θ^* varíe y para χ=0. Por ejemplo:

$$\left\langle \widehat{V}_{\text{ext}} \right\rangle = N \int \mathrm{d}^3 r \; \theta^*(\mathbf{r}) \; V_1(\mathbf{r}) \; \theta(\mathbf{r}) \longrightarrow \delta \langle \hat{V}_{ext} \rangle = N \int d^3r \, \underbrace{\delta\theta^*(\mathbf{r})}_{e^{-i0} f^*(\mathbf{r}) = f^*(\mathbf{r})} V_1(\mathbf{r}) \, \theta(\mathbf{r})$$

- Teniendo así:

$$\delta\widetilde{F} = N \int \mathrm{d}^3 r \; \delta f^*(\mathbf{r}) \; \times$$

$$\left\{ \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V_1(\mathbf{r}) - \mu \right] + (N-1) \int \mathrm{d}^3 r' \; W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \;\; \theta^*(\mathbf{r}') \; \theta(\mathbf{r}') \right\} \theta(\mathbf{r})$$

PRINCIPIO VARIACIONAL

- Aplicando el principio variacional obtenemos la ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii

$$\delta\widetilde{F} = N \int \mathrm{d}^3 r \; \delta f^*(\mathbf{r}) \times$$
$$\left\{ \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V_1(\mathbf{r}) - \mu \right] + (N-1) \int \mathrm{d}^3 r' \; W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \;\; \theta^*(\mathbf{r}') \; \theta(\mathbf{r}') \right\} \theta(\mathbf{r})$$

$$\boxed{\left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_1(\mathbf{r}) \right] + (N-1) \int \mathrm{d}^3 r' \; W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \;\; |\varphi(\mathbf{r}')|^2 \right\} \varphi(\mathbf{r}) = \mu \; \varphi(\mathbf{r})}$$

Ecuación estacionaria de Gross-Pitaevskii

- Esta ecuación es similar a la de Schrödinger pero es integro-diferencial y no lineal, con un potencial

$$V_1(\mathbf{r}) + (N-1) \int \mathrm{d}^3 r' \; W_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \;\; |\varphi(\mathbf{r}')|^2$$

LA ECUACIÓN DE GROSS-PITAEVSKII (GP)

$$\boxed{\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_1(\mathbf{r})\right] + (N-1)\int d^3r'\; W_2(\mathbf{r},\mathbf{r}')\;\;|\varphi(\mathbf{r}')|^2\right\}\varphi(\mathbf{r}) = \mu\;\varphi(\mathbf{r})}$$

- La ecuación a menudo se describe mediante la ***aproximación de rango nulo***:

$$W_2(\mathbf{r},\mathbf{r}') \Longrightarrow g\;\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

- Sustituyendo esto en la ecuación GP, donde g es la constante de acoplamiento, se llega a que:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_1(\mathbf{r}) + (N-1)\,g\,|\varphi(\mathbf{r})|^2\right]\varphi(\mathbf{r}) = \mu\varphi(\mathbf{r})$$

- **Otras normalizaciones:**

  Podríamos en vez de normalizar a 1 la función de onda normalizarla por el número de partículas multiplicando la actual por la raíz cuadrada de N (cuando N es grande $N \sim N-1$):

$$\int d^3r\,|\varphi(\mathbf{r})|^2 = N$$

$$n(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2$$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_1(\mathbf{r}) + g\,|\varphi(\mathbf{r})|^2\right]\varphi(\mathbf{r}) = \mu\varphi(\mathbf{r})}$$

COMENTARIOS FINALES

- Hay otro tratamiento más general para llegar a la ecuación GP estacionaria utilizando notación de Dirac.
- Puede probarse que la cantidad μ que surge del desarrollo mediante el tratamiento de multiplicadores de Lagrange es el potencial químico.
- Se puede hacer un tratamiento similar para llegar a la ecuación GP dependiente del tiempo.
- La ecuación GP admite soluciones solitónicas.

¡MUCHAS GRACIAS POR LA ATENCIÓN!