

Raport stiintific

Mai 2013– Septembrie 2016

Thermodynamic Properties and Correlation Functions of Low-Dimensional Ultracold Gases

Echipa

Ovidiu I. Patu CS III (Investigator principal), Cecil Pompiliu Grunfeld CS I

Rezultate

Articole ISI

[PK1] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Correlation lengths of the repulsive one-dimensional Bose gas](#), Phys. Rev. A, **88** 033623 (2013), [Impact factor (2012) 3.046 , Top 25% Optics]

[KP1] Andreas Klumper and Ovidiu Patu, [Temperature-driven crossover in the Lieb-Liniger model](#), Phys. Rev. A, **90** 053626 (2014), [Impact factor (2013) 2.991 , Top 25% Optics]

[P1] Ovidiu I. Patu, [Correlation functions and momentum distribution of one-dimensional hard-core anyons in optical lattices](#), J. Stat. Mech. P01004 (2015) [Impact factor (2014) 2.404, Top 25% Mathematical Physics]

[PK2] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Thermodynamics, density profiles and correlation functions of the inhomogeneous one-dimensional spinor Bose gas](#), Phys. Rev. A, **92** 043631 (2015), [Impact factor (2014) 2.808 , Top 25% Optics]

[PK3] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Thermodynamics, contact and density profiles of the repulsive Gaudin-Yang model](#), Phys. Rev. A, **93**, 033616 (2016) [Impact factor (2015) 2.765 , Top 25% Optics]

Articole in preparare

[PK4] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, *Thermodynamics and local correlation functions of the Bose-Fermi mixture*

Prezentari la conferinte

[C1] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Correlation lengths of the Lieb-Liniger model](#), talk presented at [„Correlation Functions of Quantum Integrable Models”](#), 4-6 Sep 2013 Dijon (France)

[C2] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Temperature driven crossover in the 1D Bose gas](#), talk presented at [„Integrable Lattice Models and Quantum Field Theories”](#), 28 June- 2 July, 2014 Bad Honnef (Germany)

[C3] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Efficient thermodynamic description of the Gaudin-Yang model](#), talk presented at [Recent Advances in Quantum Integrable Models \(RAQIS 2016\)](#) , August 22-26, 2016 Geneve (Switzerland)

[C4] Ovidiu I. Patu and Andreas Klumper, [Efficient thermodynamic description of the Gaudin-Yang model](#), talk presented at [New Trends in Low-Dimensional Physics: Quantum Integrability and Applications](#) September 1-15, 2016 Beijing (China)

Participari la conferinte

[CC1] Ovidiu I. Patu [Recent Advances in Quantum Integrable Systems](#), 1-5 September, 2014 Dijon (France)

Activitati stiintifice

Lungimi de corelatie si fenomenul de crossover in modelul Lieb-Liniger. Introdus in anii 60, modelul Lieb-Liniger care descrie un sistem de bozoni unu-dimensionali interactionind via un potential de tip delta este unul dintre cele mai studiate modele exact solvabile atat din punct de vedere teoretic cit si experimental. Desi investigatiile initiale au fost considerate in prima faza exercitii academice, progresele remarcabile din ultimii 15 ani in domeniul gazelor ultrareci au avut ca rezultat realizarea experimentală a acestui model fapt ce a impulsionat noi cercetari care au ca scop calcularea analitica a unor proprietati fizice ce pot fi comparate cu datele experimentale.

Un rol extrem de important in caracterizarea oricarui sistem il constituie functiile de corelatie care sint accesibile experimentale printr-o multitudine de metode: interferenta, analiza de particule pierdute, fotoasociere, spectroscopie Bragg, statistica fluctuatiilor densitatii etc. Desi modelul Lieb-Liniger este integrabil calcularea analitica a functiilor de corelatie este in momentul de fata o problema fara o solutie completa. Cele mai promitatoare rezultate au fost obtinute in situatia limita in care repulsia dintre bozoni este infinita (regimul Tonks-Girardeau). In acest caz comportarea asimptotica a functiilor de corelatie a fost obtinuta folosind solutia unei probleme Riemann-Hilbert asociata si a confirmat la temperaturi joase predictiile teoriei conforme de cimp (CFT) si a lichidului Tomonga-Luttinger (TLL).

In cazul repulsiei finite rezultatele din literatura sint extrem de incomplete. Impreuna cu A. Klumper am calculat comportarea asimptotica a functiilor de corelatie statice folosind o metoda noua care utilizeaza conexiunea dintre modelul Lieb-Liniger si lantul de spini de tip XXZ. O comprehensiva analiza numerica a acestor rezultate a fost prezentata in [PK1] (finantat partial din proiect) si [C1]. Analiza numerica a lungimilor de corelatie prezente in dezvoltarea asimptotica a functiei de corelatie a densitatii in modelul Lieb-Linger a relevat un fenomen extrem de interesant si complex de crossover. Simplificat fenomenul este urmatorul: la temperaturi joase termenul principal al dezvoltarii asimptotice nu prezinta oscilatii si este caracterizat de CFT/TLL. La temperaturi inalte aceasta descriere nu mai este valabila si termenul principal deviaza de la aceste predictii prezentind oscilatii. Acest fenomen este valabil pentru orice valoare a constantei de cuplaj. In limita Tonks-Girardeau (interactie extrem de puternica) fenomenul devine si mai complex al doilea termen al dezvoltarii devenind termenul principal ordinea schimbindu-se din nou la temperaturi si mai inalte. Trebuie mentionat ca aceste rezultate, obtinute cu ajutorul matricii de transfer cuantice care reprezinta principala metoda de investigare a functiilor de corelatie statice in cadrul acestui proiect, prezinta deosebit interes fiind printre singurele rezultate referitoare la modelul Lieb-Liniger caracterizat de o constanta de cuplaj finita. Rezultatele acestor investigatii au fost publicate in articolul [KP1] si prezentate in cadrul conferintei [C2].

Functii de corelatie ale anionilor 1D in latici optice. In ultimii ani cercetarea teoretica a sistemelor anionice (particule care nu sint nici bozoni nici fermioni) a cunoscut un impuls puternic datorita inovatiilor experimentale din domeniul gazelor ultrareci in latici optice care au deschis oportunitatea validarii experimentale unor astfel de sisteme. In [P1] am initiat un program de investigare a functiilor de corelatie ale anionilor hard-core localizati intr-o latice optica. Folosind sumarea factorilor de forma am obtinut reprezentarea functiilor de corelatie statice si dinamice (la $T=0$ si $T>0$) sub forma unor determinanti Fredholm. Acesti determinanti pot fi evaluati numeric extrem de eficient folosind metoda Nystrom si cuadratura Gauss-Legendre permitind obtinerea de date numerice extrem de precise (erori de 10^{-10}). De asemenea in cazul functiilor de corelatie statice am calculat comportarea asimptotica la distante mari si distributia de impuls care este detectabila experimental.

Profiluri ale densitatii si functii de corelatie locale in gazul bozonic cu doua componente. Gazul bozonic unu-dimensional cu doua componente este generalizarea naturala a modelului Lieb-Liniger. Comportarea termodinamica a acestui model a fost obtinuta in anii 70 folosind metoda Bethe Ansatz Termodinamica (TBA). Din pacate aceasta metoda produce un sistem infinit de ecuatii nonlineare cuplate din care este extrem de greu sa se extraga informatii relevante. O metoda eficienta din punct de vedere numeric a fost introdusa de catre P. si A. Klumper in cazul omogen in [KP0] si in [PK2] am inceput modificarea acesteia pentru a obtine rezultate in cazul sistemelor neomogene. Experimentele cu gaze ultrareci se desfasoara in genere in prezenta unei capcane magneto-optica care poate fi bine aproximata din punct de vedere teoretic prin prezenta in hamiltonianul sistemului a unui potential extern armonic. Desi modelele fizice considerate in acest proiect sint integrabile numai in cazul omogen (fara potential extern) prezenta potentialului armonic poate fi luata in considerare folosind aproximarea densitatii locale (Thomas-Fermi). In cadrul acestei aproximatii proprietatile termodinamice si anumite functii de corelatie ale sistemului aflat in capcana pot fi deduse din proprietatile similare ale sistemului omogen caracterizat de un potential chimic care variaza quadratic cu distanta de la centrul capcanei. In cazul gazului bozonic cu doua componente si interactie de tip delta am folosit aceasta aproximatie si ecuatiile nonlineare integrale obtinute in [PK0] pentru a calcula profilele densitatii in acest sistem. Rezultatele noastre arata ca pentru o plaja larga de valori ale parametrilor fizici (temperatura, potential chimic si cimp magnetic) nu exista o separatie a fazelor dar acest fenomen nu poate fi complet exclus. Acest lucru se datoreaza faptului ca ecuatiile devin numeric instabile in regiunea $T \sim 0$ si $H \sim 0$ datorita tranzitiei de faza prezente la $T=0$. In urma discutiilor cu participantii conferintei RAQIS 2014 [CC1] am identificat lipsa din literatura de specialitate a informatiilor privind functia locala de corelatie g_2 (local second-order correlation function). Aceasta functie de corelatie este extrem de importanta fiind accesibila experimental si poate fi obtinuta din potentialul grandcanonic al sistemului folosind teorema Hellmann-Feynman. Am implementat un nou cod numeric pentru calcularea acestei functii de corelatie in ambele cazuri (sistem omogen si neomogen) obtinand rezultate care impreuna cu profilurile densitatii au fost publicate in [PK2].

Termodinamica gazului fermionic cu doua componente. Aplicarea metodei Matricii de Transfer Cuantic (QTM) in cazul gazului fermionic unu-dimensional cu doua componente (2CFG) necesita identificarea unui model discret (definit pe latices) care rezezinta analogul discret al modelului continuu. In cazul 2CFG am identificat modelul discret care este reprezentat de catre (super)-lantul de spini de tip $U_q(sl(2|1))$ cu o gradatie specifica. Este interesant de observat ca alegerea unei gradatii diferite produce in limita continua mixtura de bozoni si fermioni. Cazul repulsiv este obtinut performind limita continua din regiunea critica ($|\cos q| < 1$) in timp ce cazul atractiv este obtinut performind limita continua din regiunea masiva ($\cosh q > 1$). Valoarea proprie matricii de transfer cuantice cu magnitudinea cea mai mare, care a fost identificata in urma analizei numerice a radacinilor Bethe si a "gaurilor", produce in limita continua potentialul grandcanonic al sistemului continuu. Rezultatul extrem de simplu obtinut in cadrul acestei etape este urmatorul:

$$\Phi(\mu, H, T) = \frac{-T}{2\pi} \int \ln(1 + a_1(k)) + \ln(1 + a_2(k)) dk$$

unde μ, H, T sint potentialul chimic, cimpul magnetic si temperatura iar functiile auxiliare $a_{1,2}$ satisfac sistemul de ecuatii

$$\ln a_1(k) = -\frac{(k^2 - \mu - H)}{T} \pm \int_{\mathbb{R} - i\epsilon} K_2(k - k') \ln(1 + a_2(k')) dk' \quad K_2(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{k(k - ic)}$$

$$\ln a_2(k) = -\frac{(k^2 - \mu + H)}{T} \pm \int_{\mathbb{R} + i\epsilon} K_1(k - k') \ln(1 + a_1(k')) dk' \quad K_1(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{k(k + ic)}$$

Semnul plus (minus) corespunde cazului atractiv (repulsiv). Eficienta metodei matricii de transfer cuantice este evidenta daca luam in considerare ca TBA (Thermodynamic Bethe Ansatz) produce un numar infinit de ecuatii nonlineare care sint extrem de greu implementabile numeric si produc erori incontroabile datorita procesului de trunciere. Ca si in cazul gazului bozonic cu doua componente pe linga proprietatile termodinamice (susceptibilitate, compresibilitate, presiune, etc.) ale sistemului omogen am calculat profilurile densitatii (pentru sistemul neomogen) si functia locala de corelatie g_2 . Aceste rezultate vor fi publicate in [PK3].

Functii de corelatie locale si contactul gazului fermionic cu doua componente. Modelul Gaudin-Yang, cunoscut si sub numele de gazul fermionic cu doua componente (2CFG), este primul model multi-component a carui solutie a fost obtinuta folosind metoda Nested Bethe Ansatz la sfirsitul anilor 60. Termodinamica acestui model a fost calculata de catre Takahashi si Lai in anii 70 folosind Thermodynamic Bethe Ansatz (TBA). Din pacate aceasta metoda produce un sistem infinit de ecuatii nonlineare integrale care este extrem de greu de manipulat chiar si din punct de vedere numeric. Din acest motiv singurele rezultate din literatura privind comportarea termodinamica a acestui model pot fi gasite numai pentru sisteme caracterizate de temperaturi apropiate de zero si interactii tari. In etapa anterioara a acestui proiect am obtinut o caracterizare termodinamica a 2CFG data de un sistem de doar doua ecuatii nonlineare integrale (NLIEs) care este valid pentru toate valorile parametrilor relevanti: temperatura, constanta de cuplaj, potential chimic si cimp magnetic (vezi mai sus). Acest sistem de ecuatii poate fi implementat numeric extrem de usor mutind contururile de integrare in jumatarea superioara si inferioara a planului complex si tratind convolutiile cu ajutorul Transformarii Fourier Rapide si teoremei convolutiei.

Sistemul de ecuatii integrale poate fi folosit pentru obtinerea de date numerice privind proprietatile termodinamice ale modelului (acestea au fost calculate in etapa precedenta a proiectului) dar si pentru calcularea functiei locale de corelatie a spinilor opusi si a contactului. S. Tan a descoperit ca distributia de impuls a fermionilor in 3D ce interactioneaza printr-un potential cu raza scurta de actiune se comporta precum $C|k|^4$ unde C este o marime fizica numita contact care este similara cu functia de corelatie a spinilor opusi care masoara probabilitatea ca doi fermioni cu spini opusi se afla in aceeasi pozitie in spatiu. Contactul apare de asemenea intr-o serie de identitati termodinamice si in teorema adiabatica Tan. Am investigat functia locala de corelatie, contactul si energia de interactie prin trei metode:

- La temperatura finita am folosit sistemul de ecuatii (vezi mai sus) si teorema Hellmann-Feynman care permite determinarea contactului, functiei de corelatie si energiei de interactie din derivata potentialului grandcanonic in raport cu constanta de cuplaj. Deoarece rezultatele noastre sint obtinute in ansamblul grandcanonic am implementat o subrutina care foloseste metoda matriciala Newton-Raphson pentru determinarea potentialului chimic si a cimpului magnetic necesare pentru a obtine valorile dorite ale densitatii si polarizarii.
- La $T=0$ energia modelului (contactul poate fi calculat cu ajutorul teoremei adiabaticice Tan din derivata energiei in raport cu constanta de cuplaj) este determinata din solutia unui sistem de ecuatii integrale de tip Fredholm pentru densitatea totala de particule si densitatea particulelor cu spin down. Am rezolvat numeric acest sistem folosind metoda Nystrom cu cuadratura Gauss-Legendre. La fel ca in cazul temperaturii finite obtinerea de rezultate la densitate si polarizare fixa te a necesitat implementarea unei subrutine pentru determinarea parametrilor necesari.
- In regimul Tonks-Girardeau (constanta de cuplaj foarte mare) si temperatura finita am calculat contactul si din transformata Fourier a functiei Green (distributia de impuls). Pentru functia Green am folosit reprezentarea sub forma de determinant Fredholm obtinuta de catre Izergin si Pronko [1] care a fost implementata numeric folosind metoda descrisa de catre Bornemann in [2].

Rezultatele noastre arata ca contactul este o functie nonmonotonica de constanta de cuplaj cit si de temperatura. Implicatiile acestui fapt devin mai transparente daca ne reamintim ca contactul reprezinta amplitudinea cozii distributiei de impuls. Prezenta unui maxim sau minim local in dependenta contactului de constanta de cuplaj sau temperatura are ca consecinta directa modificarea semnificativa a distributiei

de impuls fenomen ce poate fi detectat experimental. In regimul Tonks-Girardeau contactul prezinta un minim extrem de pronuntat intr-un interval foarte mic de temperatura care are ca rezultat ingustarea distributiei de impuls la temperatura ridicata. Acest rezultat contraintuitiv (in cazul particulelor libere sau care interactioneaza slab este de asteptat ca odata cu cresterea temperaturii populatia nivelelor cu impuls mare sa creasca) se datoreaza faptului ca avem de a face cu un sistem unu-dimensional cu interactii puternice in care apare fenomenul de "spin-charge separation". Aceste rezultate impreuna cu profilele densitatii si caracteristicile termodinamice ale modelului fac obiectul articolului [PK3] ce va fi trimis spre publicare.

Termodinamica si functiile locale de corelatie ale mixturii Bose-Fermi. Sistemul format din bozoni si fermioni unu-dimensionali interactionind via un potential de tip functie-delta este de asemenea solvabil folosind metoda Nested Bethe Ansatz. Solutiile ecuatiilor Bethe sint toate reale ceea ce inseamna ca, in principiu, aplicarea metodei TBA produce un numar finit de ecuatii. Din pacate, rezultatele din literatura nu au comportarea corecta in limita in care particulele devin impenetrabile (in acest caz termodinamica are trebui sa fie identica cu rezultatul obtinut de Takahashi pentru fermioni cu spin impenetrabili). Folosind aceeasi metoda ca in cazul modelului Gaudin-Yang si a gazului bozonic cu doua componente am obtinut un system de doua ecuatii nonlineare integrale ce caracterizeaza termodinamica mixturii si care prezinta comportarea corecta in limita impenetrabila precum si rezultatele cunoscute in cazul in care particulele nu mai interactioneaza. Rezultatul extrem de similar cu cel obtinut in cazul gazului bozonic cu doua componente si cel al modelului Gaudin-Yang este

$$\phi(\mu_B, \mu_F, T) = \frac{-T}{2\pi} \int \ln(1+a_1(k)) + \ln(1+a_2(k)) dk$$

unde μ_F, μ_B sint potentialele chimice ale bozonilor si fermionilor iar functiile auxiliare $a_{1,2}$ satisfac urmatorul sistem de ecuatii nonlineare integrale

$$\ln a_1(k) = -\frac{(k^2 - \mu_B)}{T} + \int_{\mathbb{R}} K_0(k-k') \ln(1+a_1(k')) dk' + \int_{\mathbb{R}-i\epsilon} K_2(k-k') \ln(1+a_2(k')) dk'$$

$$\ln a_2(k) = -\frac{(k^2 - \mu_F)}{T} + \int_{\mathbb{R}+i\epsilon} K_1(k-k') \ln(1+a_1(k')) dk'$$

$$K_0(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{2c}{k^2 + c^2} \quad K_1(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{k(k+ic)} \quad K_2(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{k(k-ic)}$$

Acest sistem de ecuatii reproduce rezultatele cunoscute in literatura in limita interactiilor slabe cit si rezultatul obtinut de Takahashi in regimul Tonks-Girardeau. Validitatea rezultatelor noastre a fost confirmata si de verificarea cu mare precizie a uneia dintre identitatile termodinamice in genere cunoscute sub numele de identitati Tan. Aceste identitati, care au fost determinate in cadrul acestei etape, au fost derivate folosind faptul ca desi functia de unda a sistemului este continua atunci cind doua particule se afla in acelasi punct din spatiu derivata acesteia prezinta o discontinuitate care se manifesta in distributia de impuls a sistemului.

Ecuatiile prezentate mai sus au fost folosite pentru calcularea proprietatilor termodinamice ale modelului (densitatile componentelor, caldura specifica, compresibilitatea, susceptibilitatea) dar si a contactului si functiei locale de corelatie care masoara probabilitatea ca un bozon si un fermion sa ocupe aceeasi pozitie in spatiu. Similar cu cazul gazului fermionic cu doua componente, contactul este o functie nonmonotonica de constanta de cuplaj dar in acest caz el manifesta si o dependenta semnificativa de potentialul chimic al bozonilor si fermionilor. De asemenea, mixtura de bozoni si fermioni prezinta doua intervale de temperatura distincte din punctul de vedere al universalitatii comportarii functiilor de corelatie: un interval in care teoria lichidului Tomonaga-Luttinger este aplicabila si un interval similar cu cel

descrie de catre spin-incoherent Luttinger liquid. Tranzitia dintre cele doua intervale de temperatura se observa prin prezenta unui pronuntat minim local in dependenta contactului ca functie de temperatura. Aceste rezultate care vor fi publicate probabil [PK4] dupa terminarea contractului vor mentiona explicit sursa de finantare.

Rezultate obtinute in timpul derularii contractului:

- 5 articole ISI in jurnale top 25% (zona rosie) [PK1], [KP1], [P1], [PK2], [PK3]
- un articol in preparare (finalizat in proportie de 80%) [PK4]
- 4 prezentari la conferinte internationale de top [C1], [C2], [C3], [C4]
- 1 participare la conferinta internationala [CC2]

[1] A.G. Izergin and A.G. Pronko, Nucl. Phys. **B** 520, 594 (1998).

[2] F. Bornemann, Math. Comp. **79**, 871 (2010).

Principal investigator,

Ovidiu I. Patu