

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Studio variazionale di un modello unidimensionale di supersolido

Relatore:

Prof. Francesco Ancilotto

Laureando: Filippo Vicentini

Matricola: 1027523

Anno Accademico 2013/2014

Ai giganti che mi hanno aperto gli occhi

Sommario

In questo lavoro si studia per mezzo di un semplice ansatz variazionale un condensato di Bose-Einstein con potenziale di interazione repulsivo a gradino che presenta comportamento *supersolido*. Dopo un excursus (1) sull'evoluzione della ricerca sui supersolidi, si ricava la relazione di dispersione nel sistema uniforme (2.1), che presenta un minimo rotonico. Nel capitolo 3 si studia il ground state del sistema, calcolandone in (3.1-3.2) l'energia totale per mezzo dell'ansatz variazionale, e la frazione superfluida in (3.3). In (4) si calcola la relazione di dispersione per la fase supersolida.

Indice

1	Introduzione	1
2	Sistema di Bosoni <i>Soft Core</i> nel ground state: il sistema omogeneo	5
2.1	Relazione di dispersione di Bogoliubov	6
3	Sistema di Bosoni <i>Soft Core</i> nel ground state: la fase supersolida	11
3.1	Calcolo variazionale del parametro critico Λ_c	11
3.2	Confronto tra le energie della fase uniforme e quella <i>supersolida</i> . . .	13
3.3	Calcolo della frazione superfluida	15
4	Eccitazioni collettive della fase supersolida	19
4.1	Calcolo del potenziale chimico μ	19
4.2	Forma matriciale delle equazioni	20
5	Conclusioni	25

Capitolo 1

Introduzione

Una fase supersolida della materia presenta contemporaneamente proprietà cristalline e superfluide¹. Nella teoria proposta da Leggett [1], la transizione a supersolido comporta la rottura della simmetria traslazionale continua e della simmetria di gauge globale, portando alla formazione di una struttura cristallina con coerenza di fase, che permette un flusso superfluido attraverso il reticolo. Semplificando, un sistema nella fase supersolida è composto da una frazione di particelle che si comportano come se formassero un solido cristallino (chiamata frazione o componente solida), e da una frazione di particelle che si comportano come se si trovassero in una fase superfluida completamente disaccoppiata dalla parte cristallina del solido (chiamata frazione o componente superfluida).

La transizione a supersolido è stata considerata per la prima volta da Penrose e Onsager nel 1956 [2], in uno studio sul legame fra superfluidità e condensazione di Bose-Einstein. Nel loro articolo rigettavano la possibilità di avere condensazione di B-E in una struttura cristallina, e quindi l'esistenza della fase supersolida. Questa tesi fu confutata nel 1969 da Andreev e Lifshitz [3], nello stesso articolo in cui dimostrarono che all'interno della fase supersolida è possibile la propagazione di onde sia con il modo tipico di un solido elastico, sia con il modo tipico di un superfluido. Nel 1970 Leggett calcolò un limite superiore alla frazione superfluida nell'⁴He [1], e suggerì una procedura sperimentale per osservarla sfruttando una proprietà dei sistemi superfluidi, la *Non Classical Rotational Inertia* (NCRI). Mettendo in rotazione un contenitore inizialmente a riposo riempito con un sistema in fase supersolida, la componente superfluida, avendo viscosità nulla, resterà in quiete e non contribuirà al momento d'inerzia del sistema, che sarà più piccolo di quello atteso classicamente.

Leggett ipotizzò che sfruttando questa proprietà fosse possibile misurare la frazione di atomi del supersolido che non contribuiscono al suo momento d'inerzia, e che quindi compongono la frazione superfluida del sistema.

Il limite superiore alla frazione superfluida nell'⁴He solido a $T = 0$ era dell'ordine di 10^{-4} , e la precisione necessaria per effettuare la misura andava ben oltre le capacità tecnologiche disponibili negli anni '70. Per questo motivo non fu possibile effettuare la misura fino ad anni più recenti.

¹La superfluidità è uno stato della materia caratterizzato dall'assenza di viscosità. Fu osservata sperimentalmente nell'⁴He da P. L. Kapica (1937), e spiegata in termini della condensazione di Bose-Einstein da R. P. Feynman.

Nel 2004 un esperimento portato a termine da Kim e Chan mise in evidenza un momento di inerzia non classico nell' ^4He solido [4], ma questo risultato fu poi confutato dagli stessi autori. Al momento attuale è opinione diffusa che l' ^4He non possieda una fase supersolida, e sono in corso di studio altri sistemi che potrebbero manifestare proprietà supersolide, ovvero i condensati di Bose-Einstein in gas ultra-freddi.

Modello a gas di Bosoni *soft cores*

In questa tesi viene studiato un gas di bosoni ultrafreddi (condensato di B-E) che interagiscono con un potenziale *Soft Core*, come il potenziale a gradino $V(r - r') = V_0\theta(R_c - |r - r'|)$, che vale cioè V_0 se le particelle si trovano a distanza minore di R_c e 0 altrimenti.

L'ipotesi di gas ultrafreddo è essenziale per questa descrizione: sfruttando le proprietà statistiche dei gas bosonici, per $T \rightarrow 0$ il sistema *condensa* nello spazio dei momenti, confinando una frazione sempre maggiore di particelle nello stato fondamentale [5]. A $T = 0$ tutte le particelle si trovano nello stato fondamentale, e quindi avranno lo stesso valore in modulo del momento. Nel limite di gas sufficientemente diluiti è lecito trattare il sistema in approssimazione di campo medio (MFT) [6], semplificando notevolmente la trattazione.

Per quanto detto, a basse densità il gas considerato avrà viscosità nulla, risultando essere superfluido. Aumentando la densità ci si aspetta la formazione di cluster di particelle, come si evince dalla fig. 3.1 a pagina 14. Questi cluster si dispongono secondo una struttura regolare (cristallina) ma, come vedremo, preservano un carattere parzialmente superfluido. La formazione di cluster è strettamente legata alla natura *soft core* dell'interazione: le particelle tendono a sovrapporsi completamente con un piccolo numero di particelle per evitare la (energeticamente costosa) sovrapposizione parziale con un grande numero di particelle.

Aumentando il valore del potenziale V_0 si osserva che questi cluster tendono a ridurre la propria estensione, aumentando la propria densità [7].

Da un punto di vista formale si può spiegare questa transizione legandola alla relazione di dispersione di Bogoliubov del sistema uniforme: se lo spettro delle eccitazioni $\omega(k)$ presenta un minimo *rotonico* a k_{min} finito tale che $\omega(k_{min}) = 0$, il sistema può acquistare una modulazione di vettore d'onda k senza alcun costo energetico [8]. Questo significa che il sistema può assumere spontaneamente una struttura cristallina. Affinché ciò avvenga spontaneamente è necessario anche che l'energia dello stato modulato sia inferiore all'energia dello stato uniforme.

Lo studio della dinamica di sistemi con interazione *soft-core* rimarrebbe di interesse puramente teorico se non esistesse una procedura sperimentale che permette di creare potenziali di interazione *soft-sphere* in un ensemble di atomi ultrafreddi. Tale procedura, detta *Rydberg blockade* (RB) [9], fu inizialmente sviluppata per permettere di manipolare con precisione l'informazione quantistica contenuta in un ensemble di atomi, ma recentemente si è pensato di utilizzarla per modificare l'interazione tra atomi ultrafreddi.

È così possibile creare artificialmente un potenziale di interazione che oltre a una certa distanza interatomica R_c tende asintoticamente a zero con un andamento $\propto 1/R^6$, mentre per $|r - r'| \ll R_c$ satura a un valore V_0 finito. È stato poi verificato [10] per mezzo di simulazioni numeriche che il comportamento emergente da questo

potenziale è qualitativamente equivalente a quello dovuto a un potenziale di tipo *soft-sphere*, come quello considerato in questo lavoro.

Modi collettivi di un supersolido

Riprendendo la definizione precedente, nella fase supersolida coesistono una componente solida e una superfluida. È ragionevole supporre che le eccitazioni si propagano nel supersolido con i modi tipici di entrambe le sue componenti.

Più in dettaglio, la transizione di fase che attraversa il sistema quando diventa supersolido porta alla rottura spontanea (nel caso unidimensionale qui considerato) della simmetria traslazionale e quella di gauge. Per il teorema di Goldstone, ogni rottura spontanea di simmetria porta alla creazione di un omonimo bosone senza massa, al quale può essere associato un *modo gapless*² delle eccitazioni del sistema. La rottura della simmetria traslazionale, tipica dei solidi elastici, fa comparire un modo fononico, lineare per bassi k ; la rottura della simmetria di gauge, invece, fa comparire un modo corrispondente alla propagazione delle onde in un fluido a viscosità nulla, detto di Bogoliubov. È chiaro che il supersolido manifesta la sua duplice natura in questi due modi. Simulazioni numeriche confermano questa teoria [11].

Per quanto detto prima, il sistema di bosoni ultrafreddi con potenziale di interazione $V(r - r') = V_0\theta(R_c - |r - r'|)$ a basse densità si troverà in una fase superfluida; aumentando la densità il sistema prima attraverserà la transizione a supersolido, per poi acquisire sempre più le caratteristiche di un solido ordinario. Per questo motivo, aumentando la densità, la derivata prima del modo fononico crescerà (la velocità del suono nella frazione solida aumenta), mentre l'energia del modo di Bogoliubov diminuirà, poiché la frazione di superfluido diminuisce sempre di più.

²Un modo $\omega(k)$ viene detto *gapless* se $\omega(k) \rightarrow 0$ per $k \rightarrow 0$.

Capitolo 2

Sistema di Bosoni *Soft Core* nel ground state: il sistema omogeneo

Come anticipato nell'introduzione, considero un sistema unidimensionale di N bosoni interagenti mediante potenziale a gradino Soft Core $V(r) = V_0\theta(R_c - r)$. Ponendo nullo il potenziale di confinamento, si ottiene l'Hamiltoniana:

$$H = \sum_{i=0}^N \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \sum_{j \neq i}^N V(|x_i - x_j|) \quad (2.1)$$

la quale agisce sulla funzione d'onda ψ , che scrivo in approssimazione di campo medio

$$\psi = \bigotimes_{i=0}^N \phi_i \quad (2.2)$$

Poiché il sistema è composto da bosoni, a $T = 0$ forma un condensato di Bose, portando tutte le particelle nello stato fondamentale. Questa ipotesi è essenziale, in quanto permette di descrivere tutte le particelle mediante la stessa funzione d'onda $\phi_i \equiv \phi \forall i$. E se il sistema è sufficientemente grande, allora varrà $N - 1 \approx N$.

L'energia totale $E = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ può allora essere scritta nella forma di un funzionale energia, dove si assume $\langle \phi | \phi \rangle = N$.

$$E \left[\phi, \frac{d\phi}{dx} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 + \frac{1}{2} \int dx \int dx' V(|x - x'|) |\phi(x')|^2 |\phi(x)|^2 \quad (2.3)$$

Trattando il condensato come un sistema termodinamico posso definire l'energia libera di Helmholtz $A = E - \mu N$ ove μ è il potenziale chimico del sistema. A ha un minimo nella configurazione di equilibrio [5], cioè il ground state del sistema. Calcolando le variazioni δA e ponendole uguali a zero si ottiene l'equazione di Eulero-Lagrange del sistema:

$$H\phi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \int dx' V(|x - x'|) |\phi(x')|^2 \right] \phi = \mu \phi \quad (2.4)$$

Con il cambio di variabili $\tilde{\phi}(x) = \frac{\phi}{\sqrt{\rho}}$ (dove $\rho = \langle \phi | \phi \rangle$), $\tilde{x} = \frac{x}{R_c}$ e $\tilde{\mu} = \frac{mR_c^2}{\hbar^2} \mu$ ove le variabili tildate sono adimensionali, possiamo raccogliere tutte le informazioni

dimensionali del sistema nella variabile Λ definita come segue

$$\Lambda = \frac{mR_c^3 \rho V_0}{\hbar^2} \quad (2.5)$$

Questo mi permette di riscrivere la 2.4 nella forma di una equazione di Schroedinger di tipo "autoconsistente".

$$\tilde{H}\tilde{\phi}(\tilde{x}) = \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \Lambda \int_{x-1}^{x+1} dx' |\tilde{\phi}^2(x')| \right] \tilde{\phi}(\tilde{x}) = \tilde{\mu}\tilde{\phi}(\tilde{x}) \quad (2.6)$$

La 2.6 è dunque l'equazione di Eulero-Lagrange in forma adimensionale del sistema. Notiamo in particolare che la condizione di normalizzazione $\langle \phi | \phi \rangle = N$ diventa, nel sistema adimensionale, $\langle \tilde{\phi} | \tilde{\phi} \rangle = \frac{L}{R_c} = \tilde{L}$.

Per semplicità di notazione, d'ora in poi non riporterò più le tilde e mi riferirò sempre alle variabili adimensionali definite qui sopra.

Risulta utile determinare la relazione tra potenziale chimico μ e energia del sistema E . Nella definizione dell'operatore energia 2.3 si nota che questo è dato dalla somma di due termini, $E = E_k + E_p$

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left| \frac{d\phi}{dx} \right|^2 \quad E_p = \frac{1}{2} \int dx \int dx' V(|x - x'|) |\phi(x')|^2 |\phi(x)|^2 \quad (2.7)$$

Sostituendo le definizioni di E_k e E_p nella equazione di Eulero-Lagrange 2.4, moltiplicando per ϕ^* ambi i membri e integrando in x si ottiene

$$\mu = E_k + 2E_p = 2E - E_k \quad (2.8)$$

2.1 Relazione di dispersione di Bogoliubov

Come già visto nell'introduzione, la transizione a supersolido è stata associata alla presenza di un minimo rotonico che può eventualmente intersecare l'asse k nel grafico $\omega(k)$ [8]. Sono andato a verificare che questo minimo sia presente per il sistema considerato.

Ho quindi calcolato la relazione di dispersione di Bogoliubov-de Gennes per il sistema descritto dalla 2.6 nella fase omogenea. Per calcolarlo ho trasformato l'equazione di Schroedinger dipendente dal tempo nelle unità adimensionali precedentemente definite, ottenendo la forma:

$$i \frac{mR_c^2}{\hbar} \frac{d}{dt} \phi(x) = H\phi(x) \quad (2.9)$$

Per brevità di notazione pongo $\epsilon = \frac{mR_c^2}{\hbar}$, che ha le dimensioni di un tempo, e la uso per definire la frequenza in unità adimensionali:

$$\tilde{\omega}(k) = \epsilon \omega(k) = \frac{mR_c^2}{\hbar} \omega(k) \quad (2.10)$$

D'ora in poi tralascierò la tilde e scrivendo $\omega(k)$ intenderò sempre la quantità adimensionale.

Effettuando la trasformazione di Bogoliubov sulla funzione d'onda $\phi_0(x)$, che equivale a creare due onde con energia totale nulla, si ottiene nuova funzione d'onda per lo stato eccitato:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i\mu t}{\epsilon}} \left[\phi_0(x) + u_k(x) e^{\frac{i\omega t}{\epsilon}} - v_k^*(x) e^{-\frac{i\omega t}{\epsilon}} \right] \quad (2.11)$$

Definendo per brevità: $H_0 \equiv -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2}$, $V_{eff} \equiv \Lambda \int_{x-1}^{x+1} dx' |\phi_0(x)|^2$, calcolo i vari termini della 2.9 tenendo solo quelli lineari in $u(x)$, $v(x)$:

$$i\epsilon \frac{d}{dt} \psi(x) = e^{\frac{i\mu t}{\epsilon}} \left[\mu \phi_0(x) + u_k(x) e^{\frac{i\omega t}{\epsilon}} (\mu - \omega) - v_k^*(x) e^{-\frac{i\omega t}{\epsilon}} (\mu + \omega) \right] \quad (2.12)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = e^{\frac{i\mu t}{\epsilon}} \left[H_0 \phi_0 + (H_0 u_k(x)) e^{\frac{i\omega t}{\epsilon}} - (H_0 v_k^*(x)) e^{-\frac{i\omega t}{\epsilon}} \right] \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \Lambda \psi(x) \int_{x-1}^{x+1} dx' |\psi(x)|^2 = & e^{\frac{i\mu t}{\epsilon}} [V_{eff} \phi_0(x) + \\ & + e^{\frac{i\omega t}{\epsilon}} \Lambda \left(u(x) + \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0^*(x) u_k(x) - \phi_0(x) v_k(x)) dx' \right) + \\ & + e^{-\frac{i\omega t}{\epsilon}} \Lambda \left(-v^*(x) + \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0(x) u_k^*(x) - \phi_0^*(x) v_k^*(x)) dx' \right)] \end{aligned} \quad (2.14)$$

Sostituendo nella 2.9 le 2.12, 2.13 e 2.14 e separando i termini che moltiplicano $e^{i\omega t}$ e $e^{-i\omega t}$ si ottiene il sistema di equazioni (ove ho omesso la dipendenza in x di u e v).

$$\begin{cases} u_k (\mu - \omega) = H_0 u_k + V_{eff} u_k + \Lambda \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0^* u_k - \phi_0 v_k) \\ v_k^* (-\mu - \omega) = -H_0 v_k^* + V_{eff} v_k^* + \Lambda \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0 u_k^* - \phi_0^* v_k^*) \\ \mu \phi_0 = H_0 \phi_0 + V_{eff} \phi_0 \end{cases} \quad (2.15)$$

Supponendo che il sistema abbia densità uniforme, pongo $\phi(x) = 1$, che è l'equivalente di $\phi(x) = \sqrt{\rho(x)}$ scritto in unità adimensionali. Con questo ansatz è possibile arrivare a una soluzione del sistema 2.15. In particolare la terza relazione diventa

$$\mu = V_{eff} \quad (2.16)$$

Poiché il sistema ha densità uniforme deve essere $|u_k(x)|^2 = |v_k(x)|^2 = \text{cost}$ e perciò

$$u_k(x) = u_k e^{ikx} \quad v_k(x) = v_k e^{ikx} \quad (2.17)$$

dove u_k e v_k sono costanti.

Sostituendo la 2.16 e le 2.17 nelle prime due equazioni del sistema 2.15, e prendendo il complesso coniugato della seconda, si arriva al sistema:

$$\begin{cases} \omega u_k e^{ikx} = -\frac{k^2}{2} u_k e^{ikx} + \Lambda (v_k - u_k) \int_{x-1}^{x+1} e^{ikx'} dx' \\ \omega v_k e^{ikx} = \frac{k^2}{2} v_k e^{ikx} + \Lambda (v_k - u_k) \int_{x-1}^{x+1} e^{ikx'} dx' \end{cases} \quad (2.18)$$

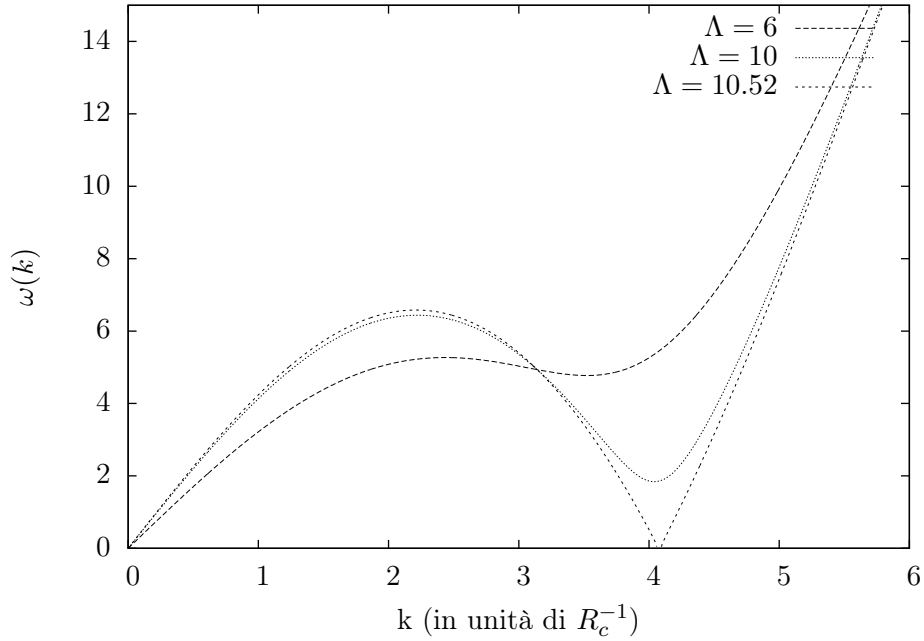


Figura 2.1: Relazione di dispersione di Bogoliubov per un gas di bosoni a densità uniforme

Noto che il termine $\Lambda \int_{x-1}^{x+1} e^{ikx'} dx'$ è la trasformata di Fourier del potenziale di interazione tra due bosoni, ed è pari a

$$\Lambda \int_{x-1}^{x+1} e^{ikx'} dx' = \Lambda 2 \frac{\sin(k)}{k} e^{ikx} = \tilde{V}_k e^{ikx} \quad (2.19)$$

ove ho definito

$$\tilde{V}_k \equiv 2\Lambda \frac{\sin(k)}{k} \quad (2.20)$$

Sostituendo questo valore nel sistema, e dividendo per e^{ikx} entrambi i membri delle equazioni, ottengo

$$\begin{cases} \omega u_k = -\frac{k^2}{2} u_k + (v_k - u_k) \tilde{V}_k \\ \omega v_k = \frac{k^2}{2} v_k + (v_k - u_k) \tilde{V}_k \end{cases} \quad (2.21)$$

Questo sistema può essere posto nella forma matriciale

$$\omega \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{k^2}{2} - \tilde{V}_k & \tilde{V}_k \\ -\tilde{V}_k & \frac{k^2}{2} + \tilde{V}_k \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Trascurando la soluzione a valori negativi, ottengo la relazioni di dispersione di Bogoliubov

$$\omega(k) = \sqrt{k \left(\frac{k^3}{4} + 2\Lambda \sin(k) \right)} \quad (2.23)$$

Studiando la fig. 2.1 si osserva che per valori di $\Lambda \approx 6$ compare un minimo rotonico intorno a $3 \leq k \leq 5$, che diventa più marcato all'aumentare di Λ . Si osserva che per un valore di $k \approx 10.52$ il minimo rotonico tocca l'asse x, cioè la modulazione di vettore d'onda $k \approx 4.1$ e periodo $L = 2\pi/k$ non ha alcun costo in energia. Come detto all'inizio del paragrafo questa è la condizione necessaria per la transizione a supersolido.

Per determinare il valore di Λ_c a cui si osserva questa modulazione spontanea, cioè il valore del parametro che identifica la transizione a supersolido, impongo due condizioni alla relazione di dispersione:

$$\begin{cases} \omega(k_c) = 0 \\ \frac{\partial \omega}{\partial k}(k_c) = 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

Le due equazioni conducono rispettivamente alle relazioni:

$$F_1(k_c) = -\frac{k_c^3 \csc(k_c)}{4} \quad (2.25)$$

$$F_2(k_c) = -\frac{k_c^3}{2(\sin(k_c) + k_c \cos(k_c))} \quad (2.26)$$

Per risolvere il sistema di equazioni dato dalle 2.25, 2.26 definisco una terza funzione $f(k_c) = F_1(k_c) - F_2(k_c)$ e ne vado a cercare numericamente lo zero per $3 \leq k \leq 5$. I risultati sono stati trovati utilizzando un algoritmo di bisezione.

$$\Lambda_c = 10.525 \qquad k_c = 4.078 \qquad L_c = \frac{2\pi}{k_c} = 1.540$$

Capitolo 3

Sistema di Bosoni *Soft Core* nel ground state: la fase supersolida

Nel capitolo precedente ho verificato per mezzo della trasformazione di Bogoliubov che il sistema considerato può esibire una transizione alla fase supersolida per $\Lambda_c \approx 10.53$ con $k_c \approx 4.08$. La soluzione dell'equazione di Eulero-Lagrange 2.6 per questo sistema è possibile solo per mezzo di metodi numerici come l'evoluzione in tempo immaginario [12] o simulazioni Montecarlo [13]. In questa tesi mi propongo invece di studiare il sistema in modo approssimato, utilizzando il metodo variazionale.

È ragionevole supporre che le modulazioni introdotte dalla transizione a supersolida siano piccole per valori di Λ vicini a Λ_c . Userò d'ora in poi il seguente ansatz sulla forma della funzione d'onda del ground state, che equivale a trascurare i termini di Fourier oltre il primo nello sviluppo della funzione d'onda:

$$\psi = \psi_0 + A \left(e^{ikx} + e^{-ikx} \right) \quad (3.1)$$

con $k = \frac{2\pi}{L}$, ove L è la lunghezza della cella unitaria del sistema (cioè la cella che nella fase non uniforme contiene esattamente un cluster di atomi), e A l'ampiezza della modulazione. Chiaramente per $A = 0$ il sistema si trova nello stato a densità costante, cioè la fase uniforme.

Per la condizione di normalizzazione $\langle \psi | \psi \rangle = L$ determinata al capitolo 2, la 3.1 in unità ridotte diventa:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{1 + 2A^2}} (1 + 2A \cos(kx)) \quad (3.2)$$

3.1 Calcolo variazionale del parametro critico Λ_c

Una prima verifica sulla ragionevolezza dell'ansatz posso farla andando a calcolare il valore Λ_c per via variazionale.

Con l'ansatz 3.2 è possibile calcolare l'energia 2.3 scritta in forma adimensionale

$$E = \frac{1}{2} \int_0^L dx \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 + \frac{\Lambda}{2} \int_0^L dx \int_{x-1}^{x+1} dx' |\psi(x')|^2 |\psi(x)|^2 \quad (3.3)$$

Ricordando che E è l'energia del sistema, definisco l'energia per unità di lunghezza $\epsilon = \frac{E}{L}$ (corrispondente all'energia per particella). Nel seguito userò il termine "liquido" (ϵ_{liq}) per indicare la fase uniforme e il termine "supersolido" (ϵ_{ss}) per indicare la fase "a cluster". Trascurando i termini d'ordine superiore a A^2 ottengo:

$$\epsilon_{liq} = \frac{E}{L} = \Lambda \quad (3.4)$$

$$\epsilon_{ss} = \frac{E}{L} = \Lambda + A^2 \left(3\Lambda + \frac{4\pi^2}{L^2} + \frac{4\Lambda L \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right)}{\pi} \right) + \mathcal{O}(A^4) \quad (3.5)$$

Chiamando $\Delta\epsilon = \epsilon_{liq} - \epsilon_{ss}$ la differenza di energia tra la fase uniforme e la fase supersolida, la transizione a supersolido si avrà quando $\Delta\epsilon = 0$ con derivata prima negativa. Per il principio variazionale la funzione d'onda dovrà essere tale da minimizzare l'energia del sistema, dunque $\frac{\partial\epsilon}{\partial L} = 0$. Perciò posso determinare Λ_c risolvendo il sistema dato da queste due condizioni:

$$\begin{cases} \Delta\epsilon = 0 \\ \frac{\partial\epsilon}{\partial L} = 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

La prima condizione porta a

$$A^2 \left(\frac{4\pi^2}{L^2} + \frac{4\Lambda L \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right)}{\pi} \right) = 0 \quad (3.7)$$

e trascurando la soluzione banale $A = 0$, la risoluzione rispetto a Λ da

$$\Lambda = -\frac{\pi^3 \csc\left(\frac{2\pi}{L}\right)}{L^3} \quad (3.8)$$

La seconda condizione porta all'equazione

$$A^2 \left(\frac{\Lambda \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right)}{\pi} - \frac{2(\Lambda L^2 \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) + \pi^2)}{L^3} \right) = 0 \quad (3.9)$$

che può essere risolta rispetto Λ ottenendo

$$\Lambda = \frac{2\pi^3}{L^2 \left(L \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) - 2\pi \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) \right)} \quad (3.10)$$

Noto che sostituendo $k = \frac{2\pi}{L}$ nelle 3.8 e 3.10 si riottengono le 2.25 e 2.26, cioè le stesse condizioni trovate studiando la relazione di dispersione di Bogoliubov, giungendo allo stesso risultato per Λ_c .

Da questo fatto possiamo ricavare un'informazione sulla natura della transizione a supersolido. La forma della funzione d'onda variazionale data dall'ansatz 3.2 dipende in modo continuo dai parametri A e L . Se la funzione d'onda non approssimata non variasse anch'essa con continuità in un intorno di Λ_c , il sistema descritto variazionalmente avrebbe una transizione differente da quella del sistema descritto in modo esatto. Il trovare con entrambe le procedure lo stesso risultato suggerisce che la transizione a supersolido del sistema considerato (unidimensionale) è continua.

Questa tesi sarà poi confermata dai risultati riportati nelle sezioni successive. Si noti comunque che la natura della transizione a supersolido dipende dalla dimensionalità del problema, infatti lo stesso sistema in 2 dimensioni [7, 14] e in 3 dimensioni [15] presenta una transizione a supersolido discreta.

3.2 Confronto tra le energie della fase uniforme e quella *supersolida*

In questa sezione verificherò che il sistema ha una transizione alla fase supersolida studiando l'andamento dell'energia $\Delta\epsilon(\Lambda)$, per poi confrontarlo con dei risultati numerici.

Come spiegato nell'introduzione, la presenza di un minimo rotonico non è sufficiente per affermare che il sistema considerato abbia una transizione a supersolido, ma bisogna anche verificare che lo stato ad energia inferiore sia quello del sistema modulato. Per fare ciò effettuo uno studio variazionale del funzionale energia del sistema ricavato nella sezione 3.1.

Poiché Λ è l'unico parametro del sistema, è sufficiente fissarlo per determinare univocamente la configurazione del sistema, data da A e L . Fissata Λ , in base al principio variazionale il sistema si troverà nello stato che soddisfa le due condizioni

$$\begin{cases} \frac{\partial\epsilon}{\partial L} = 0 \\ \frac{\partial\epsilon}{\partial A} = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

Sapendo che la transizione a supersolido si ha per $\Lambda = \Lambda_c$, valuterò il sistema per valori di Λ maggiori di Λ_c . Inoltre, dato che ora Λ può assumere valori arbitrari (non necessariamente vicini a Λ_c), ho ricalcolato la 3.3 senza limitarmi ai termini $\mathcal{O}(A^2)$.

La prima delle 3.11 può essere esplicitata in A portando alla relazione

$$A_1(\Lambda, L) = 2\sqrt{\frac{2\Lambda L^3 \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) - 4\pi\left(\Lambda L^2 \cos\left(\frac{2\pi}{L}\right) + \pi^2\right)}{\Lambda L^2\left(4\pi \cos\left(\frac{4\pi}{L}\right) - L \sin\left(\frac{4\pi}{L}\right)\right) + 32\pi^3}} \quad (3.12)$$

La seconda delle 3.11 equivale alla condizione $\frac{\partial\epsilon}{\partial A^2}$ poichè ϵ dipende solo da potenze pari di A . Anche questa equazione può essere esplicitata rispetto ad A portando alla relazione

$$A_2(\Lambda, L) = -\frac{4\left(\Lambda L^3 \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) + \pi^3\right)}{\Lambda L^3\left(\sin\left(\frac{4\pi}{L}\right) - 8 \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right)\right) + 8\pi^3} \quad (3.13)$$

Si è così ricondotto il problema alla ricerca di una radice della $f_\Lambda(L) = A_1(\Lambda, L) - A_2(\Lambda, L) = 0$ con Λ parametro fissato. Per determinare numericamente la radice ho usato un algoritmo di Newton-Raphson. Successivamente ho utilizzato il valore di L ottenuto per trovare A mediante la 3.13. In questo modo ho determinato univocamente i parametri (L, A) che determinano lo stato fondamentale del sistema. Per determinare l'energia della configurazione ho poi usato l'espressione dell'energia 3.5 senza limitarmi ai termini $\mathcal{O}(A^2)$. Ho infine calcolato $\Delta\epsilon(\Lambda)$ per valori di $\Lambda > \Lambda_{crit}$.

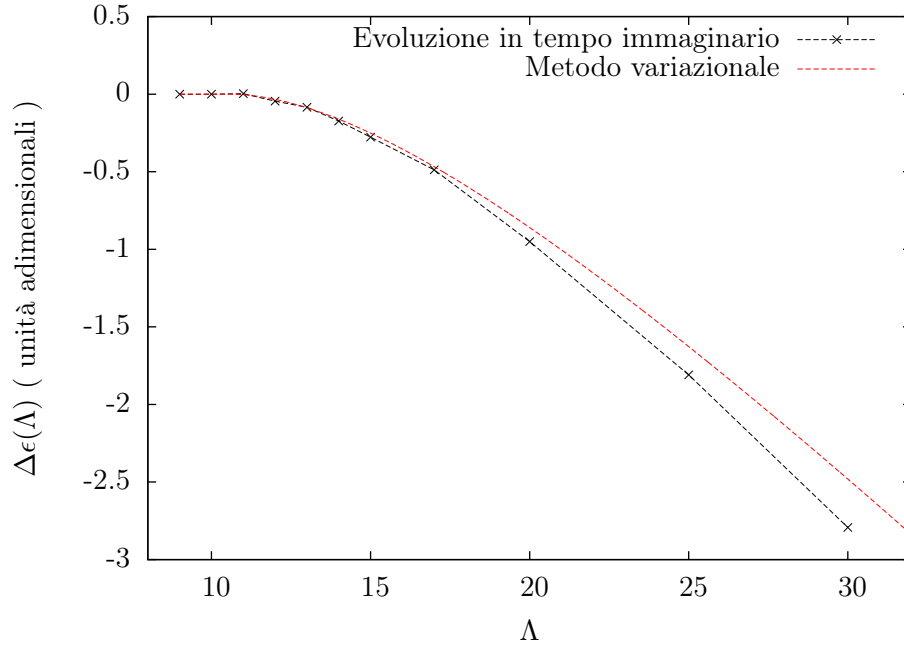


Figura 3.1: Confronto di $\Delta\epsilon(\Lambda)$ calcolati con l'ansatz variazionale e con un metodo numerico esatto di evoluzione in tempo immaginario

Per dare una stima dell'errore dovuto all'approssimazione variazionale compiuta, ho calcolato il valore esatto dell'energia del ground state del sistema 3.3 risolvendo l'equazione di Schroedinger 2.4 per mezzo di un'evoluzione in tempo immaginario usando una tecnica descritta in un lavoro di tesi precedente [12]. Per accelerare i tempi di calcolo, ho sfruttato la periodicit  del sistema evolvendo la $\psi(x, t)$ del sistema di una singola cella di lunghezza L , usando come valore di L il valore determinato variazionalmente. I risultati sono riportati nelle fig. 3.1 e 3.2. Osservando il grafico 3.1 si nota che per valori di $\Lambda \approx \Lambda_{crit}$ vi   un ottimo accordo tra il metodo numerico esatto e il metodo variazionale. Questo risultato conferma la ragionevolezza dell'ansatz. L'errore percentuale su $\Delta\epsilon$ per $\Lambda = 30$   pari al 15% del suo valore.

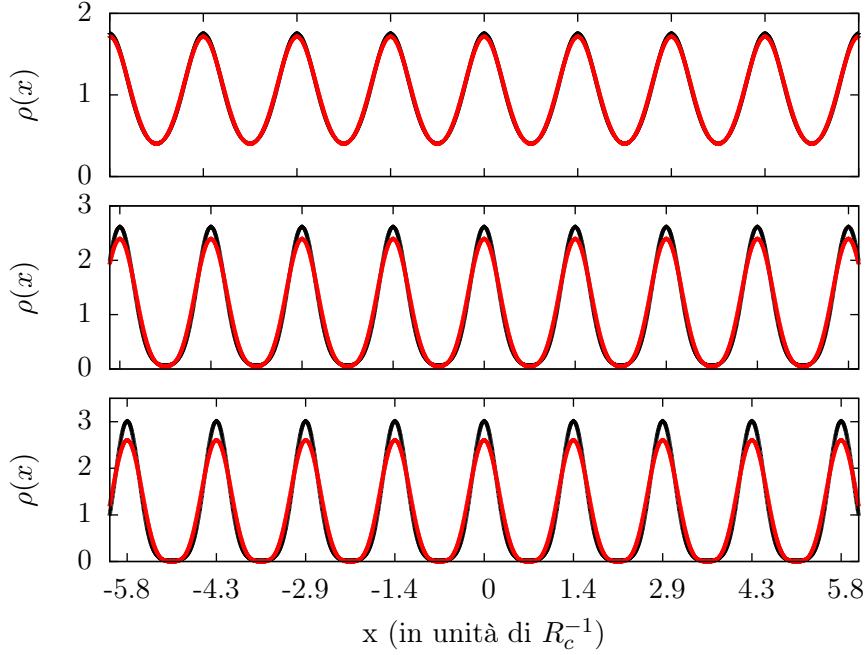


Figura 3.2: Confronto tra il profilo di densità calcolato a partire dall'ansatz variazionale (linea rossa) e quello calcolato in modo esatto con un metodo di evoluzione in tempo immaginario (linea nera). I tre profili corrispondono rispettivamente ai sistemi identificati da $\Lambda = 12$, $\Lambda = 20$ e $\Lambda = 30$ (dall'alto verso il basso).

3.3 Calcolo della frazione superfluida

Avendo verificato che il sistema possiede una fase supersolida, procedo a calcolare un limite superiore per la frazione superfluida del sistema considerato utilizzando una tecnica suggerita da [16].

Considero il sistema descritto nella sezione 3.2. Studiando il sistema ho determinato la densità del sistema $\rho(x)$ a Λ fissato. Detta $\psi(x)$ la funzione d'onda del sistema, vale la relazione $\rho(x) = |\psi(x)|^2$, con $\rho(x)$ reale. È chiaro che $\psi(x) \propto \sqrt{\rho(x)}$ a meno di un fattore di fase. Posso quindi dire che $\psi(x)$ avrà la forma

$$\psi(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{i\phi(x)} \quad (3.14)$$

ove la funzione $\phi(x)$ esprime la fase della funzione d'onda.

Come suggerito in [16] e [17] è possibile stimare un limite superiore alla frazione di superfluido in un sistema quantistico supponendo che valga l'equazione di continuità $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$, ove $\vec{j}(r) = \rho(\vec{r}) \vec{v}_s(\vec{r})$, con $\vec{v}_s = \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \phi$ la velocità della componente superfluida, associata al $\nabla \phi$. Dato che sto considerando un sistema a una dimensione d'ora in poi non riporterò più i segni di vettore, poiché tratto con quantità unidimensionali.

Chiaramente la $\nabla \cdot J = 0$ equivale in spazio di Fourier alla relazione

$$G \cdot J_G = 0 \quad (3.15)$$

ove $G = m \frac{2\pi}{L}$ sono i vettori del reticolo reciproco del solido con costante reticolare L . Espandendo in serie di Fourier la velocità e la densità del sistema si ottiene

$$\rho(x) = \sum_G \rho_G e^{iGx} \quad (3.16)$$

$$v(x) = \sum_G v_G e^{iGx} \quad (3.17)$$

E per il teorema della convoluzione, $J(x) = \rho(x) \cdot v(x)$ può essere riscritto come

$$J_G = \sum_{G'} \rho_{G-G'} v_{G'} = \sum_{G'} \rho_{G'} v_{G-G'} \quad (3.18)$$

Applicando la condizione 3.15 alla 3.18, si ottiene il sistema di equazioni

$$J_G = \sum_{G'} \rho_{G-G'} v_{G'} = 0 \quad \forall G \neq 0 \quad (3.19)$$

$$J_0 = \sum_{G'} \rho_{-G'} v_{G'} \quad (3.20)$$

Sebbene in linea di principio questo sia un sistema di infinite equazioni lineari, con l'ansatz 3.1 sulla forma della funzione d'onda, e quindi della densità, ho troncato lo sviluppo di $\rho(x)$ a soli 5 termini, di cui solo 3 indipendenti, poiché la densità $\rho(x)$ è reale. Troncando anche $v(x)$ allo stesso ordine posso riscrivere il sistema in forma matriciale ottenendo

$$\begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_1 & 0 & 0 \\ \rho_1 & \rho_0 & \rho_2 & 0 \\ 0 & \rho_2 & \rho_0 & \rho_1 \\ 0 & 0 & \rho_1 & \rho_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_2 \\ v_1 \\ v_{-1} \\ v_{-2} \end{pmatrix} = -v_0 \begin{pmatrix} \rho_2 \\ \rho_1 \\ \rho_1 \\ \rho_2 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

che equivale al sistema

$$\begin{pmatrix} \rho_0 & \rho_1 \\ \rho_1 & \rho_0 + \rho_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_2 \\ v_1 \end{pmatrix} = -v_0 \begin{pmatrix} \rho_2 \\ \rho_1 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

il quale porta alle soluzioni

$$v_2 = \frac{v_0 \rho_1^2 - v_0 \rho_0 \rho_2 - v_0 \rho_2^2}{\rho_0^2 - \rho_1^2 + \rho_0 \rho_2} \quad v_1 = \frac{-v_0 \rho_0 \rho_1 + v_0 \rho_1 \rho_2}{\rho_0^2 - \rho_1^2 + \rho_0 \rho_2} \quad (3.23)$$

Sostituendo nella 3.20 e dividendo per $\rho_0 v_0$ ottengo il limite superiore alla frazione di superfluido:

$$F_{ss}(A) = \frac{j_0}{\rho_0 v_0} = \frac{1 - 5A^2 + 6A^4 + 6A^6}{1 + 3A^2 + 8A^4 + 12A^6} \quad (3.24)$$

Per ottenere la frazione di superfluido del sistema in funzione della densità utilizzo il valore di A calcolato nella sezione 3.2.

Riporto nel grafico 3.3 la stima da me effettuata per il limite superiore della frazione superfluida in funzione del parametro adimensionale Λ . Nel grafico

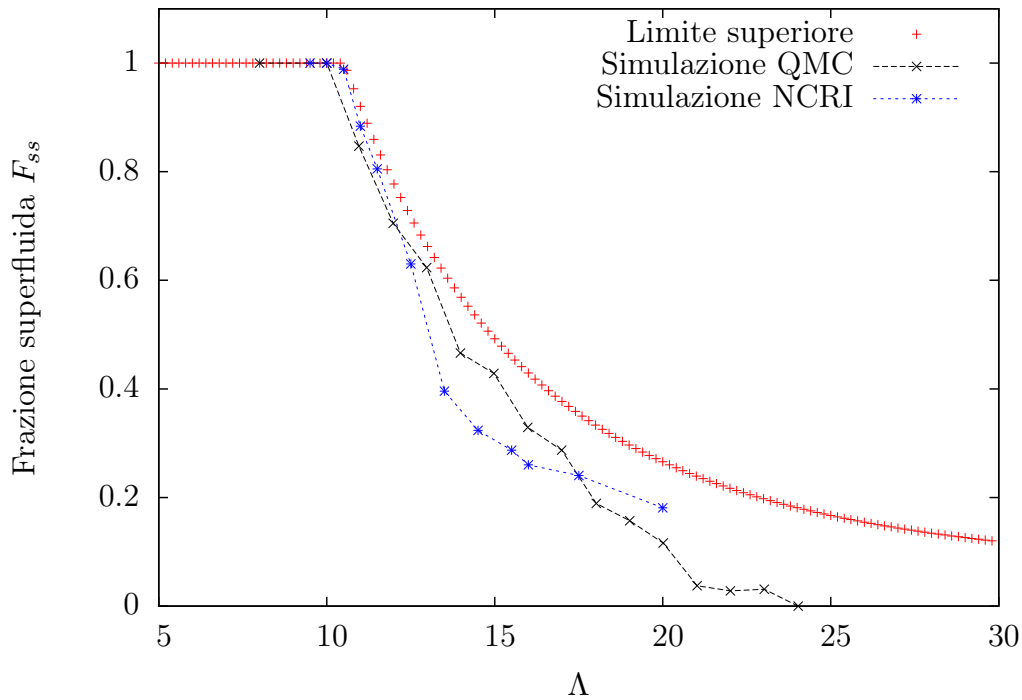


Figura 3.3: Frazione superfluida $F_{ss}(\Lambda)$

ho anche riportato i valori numerici esatti calcolati con delle tecniche Quantum-Montecarlo (QMC) in [18], e sfruttando la definizione dell'NCRI in un lavoro di tesi precedente [12]. Dalla figura 3.3 si vede che la transizione *liquido* \rightarrow *supersolido* è continua (in 2 e 3 dimensioni risulta invece essere di primo ordine).

Si nota che per $\Lambda < \Lambda_c$ il sistema è completamente superfluido (come ci si aspetta nel caso di un condensato di B-E uniforme) mentre nella fase supersolida la frazione superfluida diminuisce all'aumentare di Λ (il sistema tende a diventare sempre più simile a un solido normale). Osservando il grafico si nota che il limite superiore è sempre maggiore del valore numerico esatto, che è una ulteriore conferma della correttezza della procedura adottata.

Capitolo 4

Eccitazioni collettive della fase supersolida

In questa sezione risolvo le equazioni di Bogoliubov per il sistema nella fase supersolida (ovvero per $\Lambda > \Lambda_c$) per determinarne la relazione di dispersione delle onde. Per fare ciò seguo la stessa procedura seguita in [15] per scrivere le equazioni in forma matriciale. Per il calcolo è necessario determinare il potenziale chimico del sistema μ (vedi 2.6). Per mantenere una consistenza nel metodo numerico calcolo μ risolvendo le stesse equazioni nella stessa forma matriciale che userò per risolvere le equazioni di Bogoliubov.

4.1 Calcolo del potenziale chimico μ

Per determinare il potenziale chimico μ considero l'equazione di Eulero-Lagrange del sistema 2.6 posta in forma adimensionale

$$\begin{aligned} \tilde{H}\phi(x) &= \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_{eff}(x) \right] \phi(x) = \mu\phi(x) \\ V_{eff}(x) &= \Lambda \int_{x-1}^{x+1} dx' |\phi^2(x')| \end{aligned} \quad (4.1)$$

Se il sistema si trova nella fase supersolida la funzione d'onda sarà periodica di periodo L , e può essere scritta nella forma di Bloch dello stato fondamentale $\phi(x) = \sum_G \phi_G e^{iGx}$, ove G è un vettore del reticolo reciproco $G_m = m \frac{2\pi}{L} \mid m \in \mathcal{R}$. Per l'ansatz variazionale $\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{1+2A^2}} (1 + Ae^{iG_1x} + Ae^{iG_{-1}x})$ saranno diverse da zero solo le componenti ϕ_G con $G_{0,\pm 1}$.

Noto che il secondo termine nell'Hamiltoniana 2.6 rappresenta il potenziale efficace $V_{eff}(x)$ del sistema. Grazie al teorema di Bloch, anche questo termine potrà essere scritto nella forma di Bloch $V_{eff}(x) = \sum_G \tilde{U}_G e^{iGx}$. Poiché nel potenziale efficace compare la funzione d'onda elevata al quadrato, considerando l'ansatz variazionale, i termini di Fourier del potenziale efficace diversi da zero saranno $\tilde{U}_{0,\pm 1,\pm 2}$.

Poiché sia $\phi(x)$ che $V_{eff}(x)$ sono funzioni a valori reali i termini con coefficiente di Fourier opposto saranno uguali.

Grazie a queste considerazioni, è possibile riscrivere la 4.1 nella forma matriciale:

$$A\phi = \mu\phi \quad (4.2)$$

$$A_{G,G'} = \delta_{G,G'} \frac{G^2}{2} + \tilde{U}_{G-G'} \quad (4.3)$$

E per quanto detto sopra, sostituendo l'ansatz nel potenziale efficace posso determinare i coefficienti \tilde{U}_q

$$\tilde{U}_0 = 2\Lambda \quad \tilde{U}_{\pm 1} = \frac{\Lambda}{1+2A^2} \left(\frac{2AL}{\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right) \right) \quad \tilde{U}_{\pm 2} = \frac{\Lambda}{1+2A^2} \left(\frac{A^2L}{2\pi} \sin\left(\frac{4\pi}{L}\right) \right)$$

Per risolvere l'equazione in forma matriciale 4.2 è sufficiente diagonalizzarla e calcolarne gli autovalori. Dei vari autovalori quello di mio interesse è il più basso, che corrisponde allo stato fondamentale. L'autovettore relativo all'autovalore più piccolo conterrà le componenti di Fourier dello stato fondamentale del sistema. Per ridurre al minimo errori di troncamento di natura numerica, ho costruito la matrice da diagonalizzare ponendo nel centro della matrice il termine principale (G_0), e ponendo i termini di ordine superiore via via verso l'esterno. La forma risultante è dunque

$$A = \begin{pmatrix} & G_{-2} & G_{-1} & G_0 & G_1 & G_2 \\ G_{-2} & \frac{G_{-2}^2}{2} + \tilde{U}_0 & \tilde{U}_1 & \tilde{U}_2 & & \\ G_{-1} & \tilde{U}_1 & \frac{G_{-1}^2}{2} + \tilde{U}_0 & \tilde{U}_1 & \tilde{U}_2 & \\ G_0 & \tilde{U}_2 & \tilde{U}_1 & \frac{G_0^2}{2} + \tilde{U}_0 & \tilde{U}_1 & \tilde{U}_2 \\ G_1 & & \tilde{U}_2 & \tilde{U}_1 & \frac{G_1^2}{2} + \tilde{U}_0 & \tilde{U}_1 \\ G_2 & & & \tilde{U}_2 & \tilde{U}_1 & \frac{G_2^2}{2} + \tilde{U}_0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Poiché la matrice è ricorsiva, aumentarne le dimensioni non influisce sul valore dell'autovalore centrale (che è quello più piccolo).

Dato che i coefficienti della matrice dipendono da A e da L , per ogni Λ fissato ho determinato A e L seguendo la procedura descritta al capitolo precedente. Ho poi sostituito questi valori nella matrice e l'ho diagonalizzata numericamente.

Infine, ho verificato che il valore di μ ottenuto sia consistente con la relazione $\mu = 2E - E_k$ ricavata al 2.8, confrontando poi i valori ottenuti con il valore esatto calcolato dall'evoluzione in tempo immaginario. L'accordo è ottimo, come si evince dal grafico 4.1.

4.2 Forma matriciale delle equazioni

Riconsidero le prime due equazioni del sistema 2.15; queste sono le equazioni di Bogoliubov in forma adimensionale del sistema considerato.

$$\begin{cases} u(\mu - \omega) = H_0 u_k + V_{eff} u_k + \Lambda \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0^* u_k - \phi_0 v_k) dx' \\ v^*(-\mu - \omega) = -H_0 v_k^* + V_{eff} v_k^* + \Lambda \phi_0 \int_{x-1}^{x+1} (\phi_0 u_k^* - \phi_0^* v_k^*) dx' \end{cases} \quad (4.5)$$

ove

$$H_0 \equiv -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \quad V_{eff}(x) \equiv \Lambda \int_{x-1}^{x+1} |\phi_0(x')|^2 dx'$$

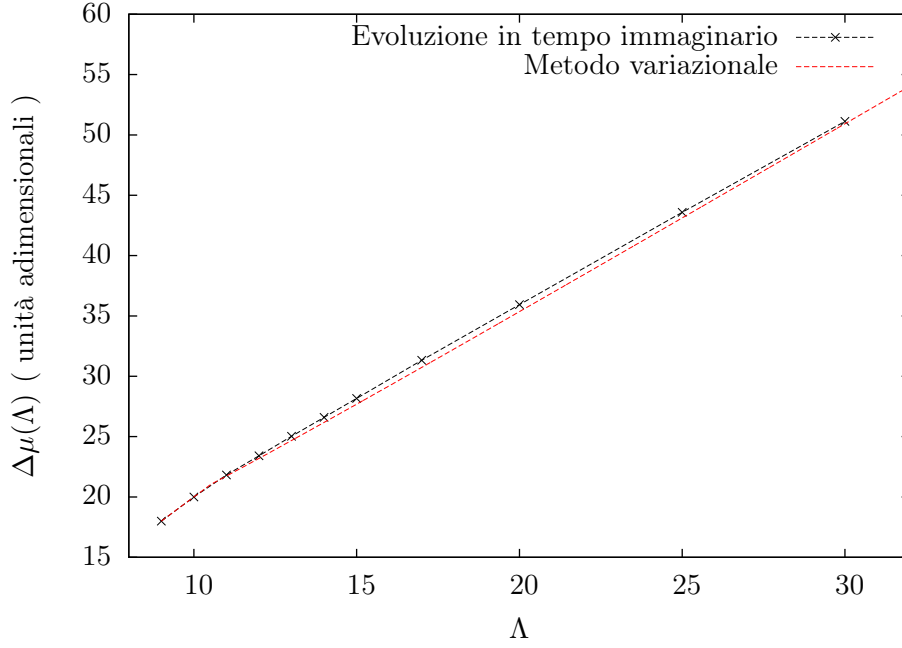


Figura 4.1: Confronto tra valore di μ così trovato e valore esatto determinato con un'evoluzione numerica in tempo immaginario

Espando le funzioni $\phi_0(x)$, $\mathcal{I}(x)$, $u_k(x)$ e $v_k(x)$ nella forma di Bloch.

$$\phi_0(x) = \sum_G \phi_G e^{iGx} \quad V_{eff} = \sum_G \tilde{U}_G e^{iGx} \quad (4.6)$$

$$u_k(x) = e^{ikx} \sum_G e^{iGx} u_{k+G} \quad v_k(x) = e^{ikx} \sum_G v_{k+G} e^{iGx} \quad (4.7)$$

Sostituendo queste forme nel sistema, raccogliendo i termini e^{iGx} , e effettuando dei cambi sui parametri delle somme, posso riscrivere le equazioni nella forma matriciale:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B} & -\mathbf{A} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_k \\ \mathbf{v}_k \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \mathbf{u}_k \\ \mathbf{v}_k \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

ove

$$\mathbf{A}_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} = \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \left[\frac{(k + \mathbf{G})^2}{2} - \mu \right] + \tilde{U}_{\mathbf{G} - \mathbf{G}'} + \sum_{\mathbf{G}''} \phi_{\mathbf{G} - \mathbf{G}''} \phi_{\mathbf{G}'' - \mathbf{G}'} \tilde{V}_{k + \mathbf{G}''} \quad (4.9)$$

$$\mathbf{B}_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} = - \sum_{\mathbf{G}''} \phi_{\mathbf{G} - \mathbf{G}''} \phi_{\mathbf{G}'' - \mathbf{G}'} \tilde{V}_{k + \mathbf{G}''} \quad (4.10)$$

dove $\tilde{V}_k \equiv 2\Lambda \frac{\sin(k)}{k}$.

Per costruire le matrici \mathbf{A} e \mathbf{B} uso lo stesso *labelling* utilizzato precedentemente ($G_{-2} - G_{-1} - G_0 - G_1 - G_2$).

Utilizzando una trasformazione unitaria [19], posso ricondurre la soluzione del problema di dimensione $2N \times 2N$ in $\mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k$ a un problema di dimensione $N \times N$ in $\mathbf{u}_k + \mathbf{v}_k$ ottenendo:

$$(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})|\mathbf{u}_k + \mathbf{v}_k\rangle = \omega^2 |\mathbf{u}_k + \mathbf{v}_k\rangle \quad (4.11)$$

Se necessario, è possibile calcolare le componenti di \mathbf{u}_k e di \mathbf{v}_k combinando gli autovalori della 4.11 con quelli del problema agli autovalori associato 4.12

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})(\mathbf{A} - \mathbf{B})|\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k\rangle = \omega^2 |\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k\rangle \quad (4.12)$$

Dalla diagonalizzazione della matrice $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})$ per differenti valori di k appartenenti alla prima zona di Brillouin $[-\frac{\pi}{L}; \frac{\pi}{L}]$ si ottengono le frequenze $\omega(k)$ dei differenti modi.

Come detto nell'introduzione, nella transizione a supersolido in una dimensione vengono rotte due simmetrie, quella traslazionale e quella di gauge. Ad ogni rottura viene associato un modo. Ci aspettiamo quindi due modi *gapless*, uno sarà dovuto alla componente superfluida (simmetria di gauge) e l'altro alla componente cristallina del supersolido.

Poiché la frazione di superfluido tende a zero per Λ grande, il modo superfluido tenderà a schiacciarsi sull'asse k all'aumentare di Λ . Viceversa, poiché il supersolido diventa sempre più un "solido ordinario" all'aumentare di Λ , la derivata prima del modo fononico aumenterà con Λ , cioè aumenta la velocità delle onde nella parte solida.

Poiché uno dei due modi del supersolido evidenzia la sua natura cristallina, si può provare a descriverlo con lo stesso modello usato nei solidi cristallini. Il modello più semplice è la catena monoatomica, dove si suppone che gli atomi in ogni sito reticolare interagiscano elasticamente con i loro primi vicini. Risolvendo le equazioni del moto di questo sistema si ottiene una legge di dispersione del tipo

$$\omega(k) = \sqrt{4\frac{c}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \quad (4.13)$$

ove m è la massa dei singoli atomi, a il passo reticolare, e c la costante elastica dell'interazione fra primi vicini. A centro zona ($k = 0$) la velocità del suono è $v = \sqrt{4\frac{c}{m}}(\frac{a}{2})$, e $\omega(k)$ ha andamento lineare.

Anche il supersolido ha una struttura cristallina, ove nei siti reticolari, al posto dei singoli atomi, vi sono dei cluster di particelle. Inoltre, come si evince dalla forma del potenziale efficace V_{eff} definito nella 4.5, ogni cluster è immerso in una buca di potenziale. Per piccole oscillazione l'espansione in serie di Taylor del potenziale efficace sarà armonico, e quindi le onde si propagheranno come nel caso della catena monoatomica. Ci aspettiamo quindi che il modo fononico del supersolido abbia andamento proporzionale a $\sin\left(\frac{kL}{2}\right)$.

Il risultato della diagonalizzazione di $(\mathbf{A} - \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B})$ porta a risultati qualitativamente in disaccordo con quanto detto sopra: si ritrova un modo che si comporta qualitativamente come quello superfluido, ma non compare il modo fononico.

Sebbene l'approssimazione variazionale non abbia evidenziato anomalie nello studio dello stato fondamentale, questa discrepanza non è totalmente imprevista. Avendo a disposizione solamente una componente di Fourier per la descrizione della funzione d'onda, e due per la densità (le altre sono fissate dalla normalizzazione), l'approssimazione non è in grado di riprodurre configurazioni corrispondenti a stati eccitati che richiederebbero un numero maggiore di componenti di Fourier.

Per calcolare lo spettro delle eccitazioni del supersolido ho quindi utilizzato un metodo numerico descritto in [15], ottenendo lo spettro delle figure 4.2 e 4.3. Noto che i risultati ottenuti con questo metodo numerico sono qualitativamente in accordo con quanto atteso, poiché si nota che, aumentando Λ , la "forbice" tra i due modi si allarga. Come atteso, il modo fononico ha andamento lineare per bassi k , è proporzionale a $\sin(kL/2)$ e la velocità delle onde a centro zona aumenta all'aumentare della densità (Λ).

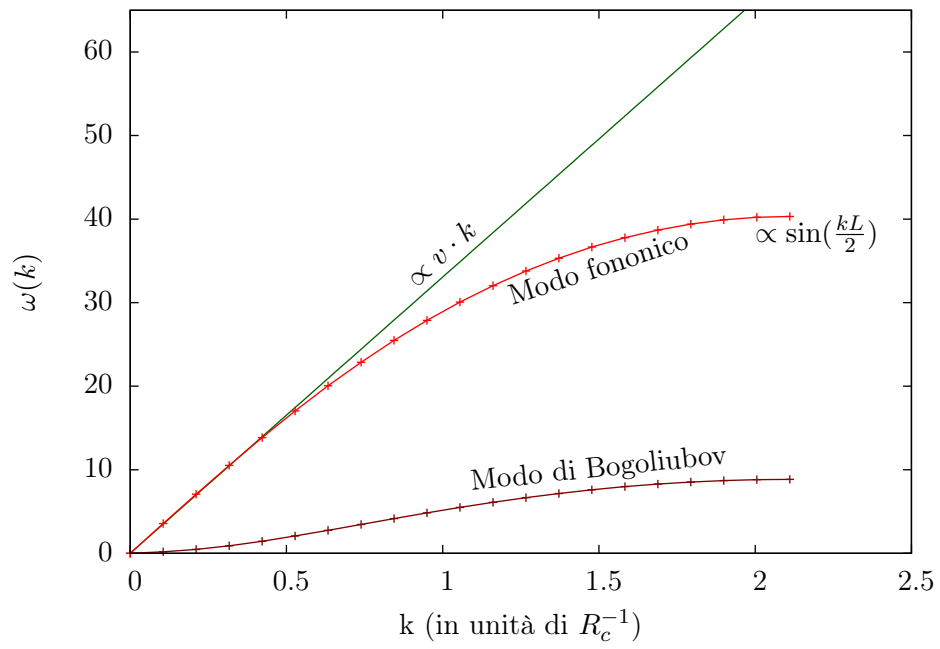


Figura 4.2: Modi di eccitazione *gapless* calcolati numericamente per $\Lambda = 20$

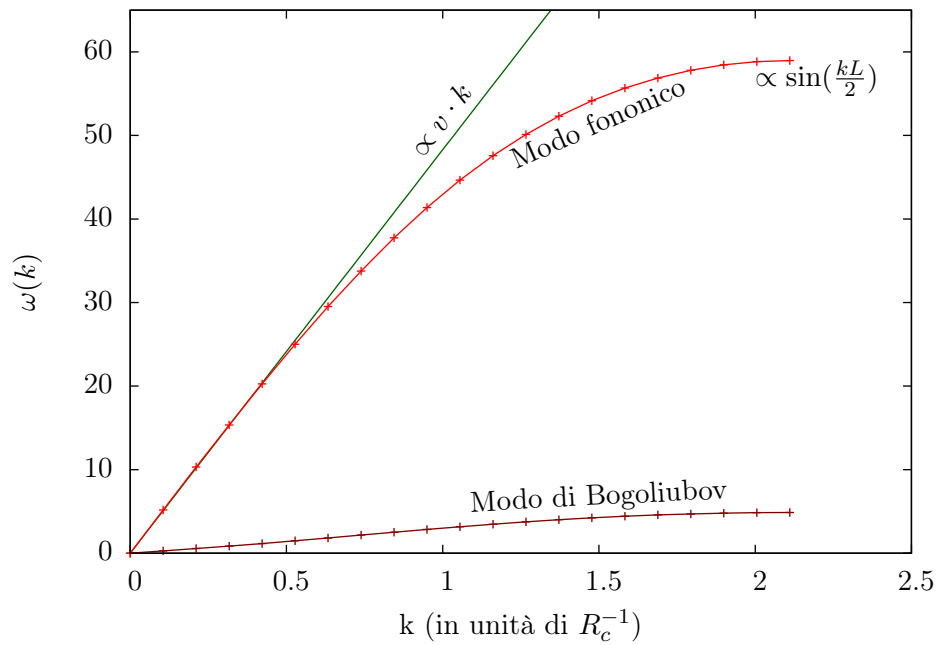


Figura 4.3: Modi di eccitazione *gapless* calcolati numericamente per $\Lambda = 30$

Capitolo 5

Conclusioni

In questa tesi è stato trattato un sistema unidimensionale di bosoni a $T = 0$ interagenti per mezzo di un potenziale *soft core* (vedi eq. 2.1). Nel capitolo 2 si è mostrato che è possibile riscrivere le equazioni di Eulero-Lagrange del sistema in una forma adimensionale, ove tutta l'informazione dimensionale del sistema è contenuta in un parametro adimensionale Λ (2.5), che quindi identifica univocamente la configurazione del sistema.

Si è ricavata poi la relazione di dispersione di Bogoliubov $\omega(k)$ per il sistema nella fase omogenea. Si è poi mostrato che per un valore critico Λ_c la relazione di dispersione di Bogoliubov $\omega(k)$ ha un minimo per un valore finito di k_{min} (minimo *rotonico*) tale che $\omega(k_{min}) = 0$, che è condizione necessaria affinché il sistema possa mostrare transizione a una fase supersolida.

Il sistema è stato poi studiato in una forma approssimata mediante un semplice ansatz variazionale sulla forma della funzione d'onda (eq. 3.1), che equivale a troncatura dello sviluppo in serie di Fourier della funzione d'onda ai primi 2 termini. Nella sezione 3.1 si è mostrato per mezzo del principio variazionale che il sistema approssimato presenta una transizione alla fase supersolida per lo stesso Λ_c trovato prima, mostrando poi (sez. 3.3), attraverso il calcolo della frazione superfluida, che la transizione dalla fase omogenea alla fase supersolida del sistema trattato è continua, a differenza della transizione del primo ordine che emerge nel sistema trattato in due o tre dimensioni. Grazie al confronto tra il sistema approssimato e quello non approssimato (sez. 3.2), si è verificato che l'approssimazione usata descrive bene il sistema in un ampio intervallo di valori di Λ .

Per ricavare la relazione di dispersione per la fase supersolida si sono risolte le equazioni di Bogoliubov del sistema approssimato (sez. 4.2), giungendo però a risultati discordanti con quanto descritto in letteratura. Si è ipotizzato che alla base di questa discrepanza vi sia l'ansatz variazionale stesso, che troncando a soli 2 termini lo sviluppo di Fourier della funzione d'onda, non permette a questa di descrivere propriamente le modulazioni degli stati eccitati. Risolvendo infine le equazioni di Bogoliubov del sistema non approssimato in modo numerico ho verificato che il sistema considerato ha uno spettro di eccitazione con due modi *gapless* (modo fononico e modo di Bogoliubov), come atteso.

Bibliografia

- [1] A. J. Leggett. 1970. «Can a Solid Be "Superfluid"?» In: *Physical Review Letters* 25.22, pp. 1543–1546. DOI: [10.1103/PhysRevLett.25.1543](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.25.1543).
- [2] O. Penrose e L. Onsager. 1956. «Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium». In: *Physical Review* 104.3, pp. 576–584. DOI: [10.1103/PhysRev.104.576](https://doi.org/10.1103/PhysRev.104.576).
- [3] A. F. Andreev e I. M. Lifshitz. 1969. «Quantum Theory of Defects in Crystals». In: *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 29.6, pp. 1107–1113. DOI: [10.1070/PU1971v013n05ABEH004235](https://doi.org/10.1070/PU1971v013n05ABEH004235).
- [4] E. Kim e M. H. W. Chan. 2004. «Probable observation of a supersolid helium phase». In: *Nature* 427.6971, pp. 225–227. DOI: [10.1038/nature02220](https://doi.org/10.1038/nature02220).
- [5] K. Huang. 1987. *Statistical Mechanics, 2nd Edition*. Wiley. ISBN: 978-0471815181.
- [6] P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis e R. Carretero-Gonzalez. 2008. «Basic Mean-Field Theory for Bose–Einstein Condensates». In: *Emergent Nonlinear Phenomena in Bose-Einstein Condensates*, pp. 1–20. DOI: [10.1007/978-3-540-73591-5](https://doi.org/10.1007/978-3-540-73591-5).
- [7] N. Sepúlveda, C. Jossierand e S. Rica. 2010. «Superfluid density in a two-dimensional model of supersolid». In: *The European Physical Journal B* 78.4, pp. 439–447. DOI: [10.1140/epjb/e2010-10176-y](https://doi.org/10.1140/epjb/e2010-10176-y).
- [8] D. Kirzhnits e Y. Neopomnyashchii. 1970. In: *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 59, p. 2203.
- [9] N. Henkel, R. Nath e T. Pohl. 2010. «Three-Dimensional Roton Excitations and Supersolid Formation in Rydberg-Excited Bose-Einstein Condensates». In: *Physical Review Letters* 104.19, p. 195302. DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.195302](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.195302).
- [10] F. Cinti et al. 2010. «Supersolid Droplet Crystal in a Dipole-Blockaded Gas». In: *Physical Review Letters* 105.13, p. 135301. DOI: [10.1103/PhysRevLett.105.135301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.135301).
- [11] S. Moroni, M. Boninsegni e S. Saccani. 2012. «Excitation Spectrum of a Supersolid». In: *Physical Review Letters* 108.17, p. 175301. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.175301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.175301).
- [12] C. E. Agrapidis. 2013. *Numerical study of one dimensional supersolid model*.
- [13] S. Moroni, M. Boninsegni e S. Saccani. 2011. «Phase diagram of soft-core bosons in two dimensions». In: *Phys. Rev. B* 83.9, p. 092506. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.092506](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.092506).
- [14] T. Macrì et al. 2013. «Elementary excitations of ultracold soft-core bosons across the superfluid-supersolid phase transition». In: *Physical Review A* 87.6, p. 061602. DOI: [10.1103/PhysRevA.87.061602](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.061602).

- [15] F. Ancilotto, M. Rossi e F. Toigo. 2013. «Supersolid structure and excitation spectrum of soft-core bosons in three dimensions». In: *Physical Review A* 88.3, p. 033618. DOI: [10.1103/PhysRevA.88.033618](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.033618).
- [16] W. M. Saslow. 2012. «On the Superfluid Fraction and the Hydrodynamics of Supersolids». In: *Journal of Low Temperature Physics* 169.3-4, pp. 248–263. DOI: [10.1007/s10909-012-0655-y](https://doi.org/10.1007/s10909-012-0655-y).
- [17] D. E. Galli, L. Reatto e W. M. Saslow. 2007. «Two-Body Correlations and the Superfluid Fraction for Nonuniform Systems». In: *Journal of Low Temperature Physics* 149.1-2, pp. 53–63. DOI: [10.1007/s10909-007-9501-z](https://doi.org/10.1007/s10909-007-9501-z).
- [18] T. Macrì. 2012. *Excitation spectrum of supersolids*. Internal report at Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems. URL: http://www.iip.ufrn.br/media/pdf/Macri_30_8_2012.pdf.
- [19] M. Nooijen e R. J. Bartlett. 1997. «Similarity transformed equation-of-motion coupled-cluster study of ionized, electron attached, and excited states of free base porphyrin». In: *The Journal of Chemical Physics* 106.15, pp. 6449–6455. DOI: [10.1063/1.473635](https://doi.org/10.1063/1.473635).