Ultrahladni bozonski sustavi proučeni kvantnim Monte Carlo metodama

Dželalija, Krešimir

Doctoral thesis / Disertacija

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:026714

Rights / Prava: In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: **2024-03-28**

Repository / Repozitorij:

Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb



Sveučilište u Zagrebu

Prirodoslovno-matematički fakultet

Fizički odsjek

Krešimir Dželalija

Ultrahladni bozonski sustavi proučeni kvantnim Monte Carlo metodama

DOKTORSKI RAD

Zagreb, 2020.



University of Zagreb

Faculty of science

Department of Physics

Krešimir Dželalija

Ultracold Bose systems studied by Quantum Monte Carlo methods

DOCTORAL THESIS

Zagreb, 2020.

INFORMACIJE O MENTORICI

Ovaj je doktorski rad izrađen na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Splitu pod mentorstvom prof. dr. sc. Leandre Vranješ Markić (leandra@pmfst.hr, CROSBI profil: https://bib.irb.hr/lista-radova?autor=234884).

Do sada je pod mentorstvom prof. dr. sc. Leandre Vranješ Markić izrađeno 3 doktorska rada tijekom čijih je izrada objavljeno 5 koautorskih CC radova s dr. sc. Ivanom Bešlić (obranila doktorski rad 2010.), 4 CC rada s doc. dr. sc. Petrom Stipanovićem (obranio doktorski rad 2015.) i 3 CC rada s Krešimirom Dželalijom. Leandra Vranješ Markić, zajedno sa suradnicima, objavila je do sada 50 radova koje registrira Current Contents.

Zahvaljujem mentorici prof. dr. sc. Leandri Vranješ Markić na vodstvu kroz rad, stručnim i konstruktivnim savjetima te moru strpljenja i razumijevanja tijekom istraživanja i izrade ovoga rada.

Zahvaljujem prof. dr. sc. Jordiju Boronatu i prof. dr. sc. Henryju R. Glydeu na diskusiji rezultata, idejama i savjetima prilikom proračuna.

Zahvaljujem kolegama Viktoru Cikojeviću i doc. dr. sc. Petru Stipanoviću na stručnim i tehničkim savjetima.

Zahvaljujem svojoj predivnoj supruzi Heleni, našoj djeci, svojim roditeljima Mili i Neli, baki Lenki, roditeljima moje supruge Pavlu i Katici, ostaloj užoj i široj obitelji i prijateljima na pomoći i podršci.

Ad maiorem Dei gloriam

SAŽETAK

Ultrahladni bozonskih sustavi proučeni kvantnim Monte Carlo metodama

KREŠIMIR DŽELALIJA

Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet

Ruđera Boškovića 33, 21 000 Split

Istražena su svojstva interagirajućih ultrahladnih bozonskih sustava korištenjem kvantnih Monte Carlo simulacija. Ispitana je suprafluidnost i Bose-Einsteinova kondenzacija vrlo rijetkih dvokomponentnih bozonskih mješavina u ovisnosti o temperaturi. Ovisno o interakcijama, sustav može biti u tri različita režima: miješanom, separiranom u dvije nakupine i separiranom u ljuskastom režimu. Uočena je anizotropnost suprafluidnosti u slučaju separacije u obliku dviju nakupina. Također je uočen i prijelaz pri kojem udio suprafluida postaje manji od udjela Bose-Einsteinovog kondenzata za svaki režim. Nadalje smo istražili svojstva jednodimenzionalnih jakointeragirajućih bozonskih sustava u periodičnim potencijalima. Detaljno je prikazan prijelaz suprafluida u Mottov izolator u režimima robusnog i fragilnog suprafluida. Istražili smo prijelaz iz jednodimenzionalnog u dvodimenzionalni sustav helija-4 unutar nanopore. Analizirali smo skaliranje suprafluidnosti s umnoškom temperature i duljine simulacijske ćelije te slaganje rezultata s teorijskim opisom. Uočen je prijelaz sustava helija-4 iz jednodimenzionalnog u dvodimenzionalni s povećanjem linijske gustoće unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å što je vidljivo u ponašanju korelacijskih funkcija i suprafluidnosti.

Jezik izvornika: hrvatski

Ključne riječi: Kvantne Monte Carlo metode, helij, bozonske mješavine, suprafluidnost, Bose-Einsteinova kondenzacija, korelacijske funkcije, jednodimenzionalni sustav, dvodimenzionalni sustav

Mentorica: Prof. dr. sc. Leandra Vranješ Markić

Abstract

Ultracold Bose systems studied by Quantum Monte Carlo methods

KREŠIMIR DŽELALIJA

University of Split, Faculty of Science

Ruđera Boškovića 33, 21 000 Split

The properties of interacting ultracold Bose systems were investigated using quantum Monte Carlo simulations. The superfluidity and Bose-Einstein condensation of very dilute two species trapped bosons mixtures as a function of temperature were investigated. Depending on the interactions, the system can be in three different modes: mixed, separated into two blobs, and separated in a shell regime. Anisotropy of superfluidity was observed in the case of two blobs. A transition was also observed in which the superfluidity fraction becomes smaller than the condensate fraction for each regime. We further investigated the properties of one dimensional strongly interacting bosonic systems in periodic potentials. The transition of the superfluid to the Mott insulator phase in the robust and fragile superfluid regimes is shown in detail. We investigated transition from a one-dimensional system to a two-dimensional one of helium-4 in the nanopore. We analyzed the scaling of the helium-4 superfluidity with the product of the temperature and the length of the simulation cell and the agreement of the results with the theoretical predictions. The transition of the helium-4 system from one-dimensional to two-dimensional with an increase in the linear density within the nanopores of radius $R = 4$ Å was observed, which is visible in the behavior of the correlation function and suprafluidity.

Original in: Croatian

Keywords: Quantum Monte Carlo methods, helium, Bose-Bose mixtures, superfluidity, Bose-Einstein condensation, correlation functions, one dimensional system, two dimensional system

Supervisor: Professor Leandra Vranješ Markić, PhD, Full Professor

SADRŽAJ

1 UVOD **1**

1.1 Jednodimenzionalni bozonski sustav u periodičnom potencijalu 1

1.2 Kvazi-jednodimenzionalni i dvodimenzionalni ^{4}He 2

1.3 Dvokomponentne bozonske mješavine u harmoničkoj zamci 4

2 KVANTNE MONTE CARLO METODE **7**

2.1 Metropolis algoritam 7

2.2 Varijacijski Monte Carlo 9

2.3 Difuzijski kvantni Monte Carlo 11

2.4 Monte Carlo Integral po stazama (PIMC) 14

2.4.1 Interpretacija i klasični izomorfizam 18

2.4.2 Worm algoritam 21

2.4.3 Procjena suprafluidnosti 30

2.4.4 Procjena udjela Bose-Einsteinovog kondenzata 34

2.4.5 Procjena standardne pogreške 36

2.4.6 Testiranje procjene udjela suprafluida 37

2.4.7 Testiranje procjene udjela Bose-Einsteinovog kondenzata 39

3 JAKO INTERAGIRAJUĆI JEDNODIMENZIONALNI SUSTAV BOZONA U PERIODIČNOJ REŠETKI **43**

3.1 Teorija Luttingerove tekućine 43

3.2 Model i metoda 45

3.3 Analize metoda 46

3.3.1 Analiza slobodnih parametara PIMC metode 47

3.3.2 Analiza vremenskog koraka DMC metode 51

3.4 Rezlutati istraživanja jednodimenzionalnog sustava helija ^{4}He 53

3.4.1 Sustav bez vanjskog potencijala 54

3.4.2 Sustav ^{4}He u periodičnom vanjskom potencijalu 56

4 PRIJELAZ IZ JEDNODIMENZIONALNOG U DVODIMENZIONALNI SUSTAV TEKUĆEG ^{4}He U NANOPORI **68**

4.1 Metoda i model nanopore 68

4.2 Rezultati 71

5 DVOKOMPONENTNE BOZONSKE MJEŠAVINE U HARMONIČKOJ ZAMCI 88

5.1 Model i metoda 88

5.2 Rezultati 89

5.2.1 PIMC Analiza vremenskog koraka 92

5.2.2 Miješani režim 95

5.2.3 Separirani režim: dvije nakupine 99

5.2.4 Separirani režim: ljuske 105

5.2.5 Jednokomponentni sustav 109

6 ZAKLJUČAK 113

LITERATURA 116

1 UVOD

Posljednjih godina, napredak u manipulaciji ultrahladnim plinovima stvorio je sasvim novi način proučavanja jako koreliranih sustava, posebno kolektivnih višečestičnih fenomena kao što su suprafluidnost i Bose-Einsteinova kondenzacija [1]. Niz desetljeća tekući helij bio je idealni model jako koreliranog sustava u kojem su po prvi put otkrivene i kasnije u različitim uvjetima proučavane suprafluidnost i Bose-Einsteinova kondenzacija. Adsorpcijom na različitim supstratima stvoreni su sustavi niže dimenzionalnosti. Osim adsorpcijom, ultrahladne atome moguće je zarobiti u zamkama i umjetnim rešetkama različitih geometrija, koje se stvaraju laserskim snopovima [2]. Postoji širok interes za niskodimenzionalne sustave, osobito jednodimenzionalne i kvazi-jednodimenzionalne, što se reflektira u preglednim radovima [3, 4].

Korištenjem kvantnih Monte Carlo simulacija moguće je istražiti svojstva ultrahladnih bozonskih sustava različitih dimenzija pri apsolutnoj nuli i pri konačnim temperaturama. Pritom egzaktne kvantne Monte Carlo metode možemo interpretirati kao virtualne eksperimente, koji nam omogućavaju detaljno ispitivanje temperaturne ovisnosti Bose-Einsteinovog kondenzata i udjela suprafluida. U ovom smo radu istražili tri sustava za koja u nastavku prikazujemo pregled istraživanja i otvorena pitanja.

1.1 Jednodimenzionalni bozonski sustav u periodičnom potencijalu

Interagirajući jednodimenzionalni (1D) sustavi u periodičnim potencijalima i neredu bogati su zanimljivim fizikalnim fenomenima koji još uvijek nisu potpuno istraženi bez obzira na dugogodišnje istraživanje [3, 4]. Očekivano je da je teorija Luttingerove tekućine (LL teorija) dobar opis niskoenergijskih jednodimenzionalnih sustava [5]. U uniformnom se jednodimenzionalnom sustavu kvazi-suprafluidni režim predviđa za Luttingerov parametar, $K > 1/2$, a za $K < 1/2$ kvazi-kristalni režim [6]. Ovisno o parametru K predviđa se da će sustav imati različiti odziv na različite vanjske potencijale. Za velike vrijednosti Luttingerova parametra, $K > 2$, sustav je robusan na periodični vanjski potencijal [7], a za $K > 3/2$ robusan na nered, tj. nasumični potencijal [7]. Za $K > 1$ sustav je robusan na jednu nečistoću [8], a za $K < 1$ sustav je osjetljiv na bilo kakav podražaj. Za $K < 3/2$ nasumični potencijal inducira prijelaz iz kvazi-suprafluidnog režima u Mott-izolator fazu [7] dok suprafluid - Mottov izolator prijelaz inducira sumjerljiva

optička rešetka za $K < 2$ [1]. Suprafluidnost u jednoj dimenziji je efekt konačne veličine, ovisi o umnošku duljine i temperature, što znači da iščezava u termodinamičkom limesu za bilo koju konačnu temperaturu. Za korelacijske se funkcije predviđa algebarsko opadanje pri, $T = 0$ K, dok za konačne temperature očekujemo prijelaz u eksponencijalno opadanje [9]. Prijelaz iz suprafluida u Mottov izolator teorijski je već istražen u granici kad temperatura teži u nulu korištenjem kvantnih Monte Carlo simulacija [10–15], a također je i eksperimentalno potvrđen s ultrahladnim plinovima koji su zarobljeni u duguljastim tankim zamkama s plitkim potencijalom [16]. Pomoću kvantnih Monte Carlo simulacija je mapiran fazni dijagram SF-MI prijelaza za $T = 0$ K te je demonstrirana primjenjivost Bose-Hubbard modela koji se uobičajeno koristi za duboke rešetke i primjenjivost sine-Gordon modela koji opisuje jednodimenzionalne sustave u plitkim optičkim rešetkama [10–15]. Optičke zamke pokazale su se kao jako dobar alat za proučavanje suprafluidnosti inducirane defektima [17].

Osim pomoću optičkih zamki, jednodimenzionalni se sustavi mogu kreirati unutar nanopora ili cjevčica. Tako se najčešće proučava ^{4}He u 1D. Helij je proučen u jednoj dimenziji u ref. [18–20], a svojstva Luttinger tekućine su demonstrirana u ref. [21]. Helijeva su svojstva Luttingerove tekućine, također, promatrana u kvazi-1D nanoporama [22–26]. Preciznije, u ref. [25] je pokazano da 1D ponašanje postoji samo za uske pore, kada se dva atoma ne mogu mimoići. U ref. [26], helij je proučen pri različitim gustoćama te su proučena svojstva Luttingerove tekućine pri konačnim temperaturama.

Nisu poznata svojstva helija u jednoj dimenziji pri konačnim temperaturama uz vanjski potencijal oblika periodične rešetke. Atomi helija mogu imati različito punjenje vanjske optičke rešetke: cjelobrojno punjenje po jamama ili necjelobrojno. Naš cilj je pomoću kvantnih Monte Carlo metoda proučiti svojstva jednodimenzionalnog helija unutar periodične rešetke s prosječno jednim atomom po jami pri konačnim temperaturama i pri apsolutnoj nuli te usporediti rezultate dviju metoda međusobno i sa teorijskim opisom Luttingerove teorije. U ovom ćemo radu razmotriti cjelobrojno punjenje po jamama.

1.2 Kvazi-jednodimenzionalni i dvodimenzionalni ^{4}He

Dimenzionalnost kvantnog sustava značajno utječe na njegovo ponašanje. Egzotični fenomeni trodimenzionalnih sustava kao što su Bose-Einsteinova kondenzacija, suprafluidnost i supravo-

dljivost su detaljno izučeni u ref. [27–33]. U trodimenzionalnim bozonskim sustavima postoji konačna temperatura, T_c, pri kojoj udio Bose-Einsteinovog kondenzata i udio suprafluida prelazi iz nule iznad temperature prijelaza do konačne vrijednosti [33, 34]. Općenito, udio Bose-Einsteinovog kondenzata, $n_0 = N_0/N$, i udio suprafluida, ρ_S/ρ_0, postupno rastu od nule do neke konačne vrijednosti manje ili jednake jedinici pri apsolutnoj nuli, $T = 0$ K, ovisno o međuatomskim interakcijama i vanjskom potencijalu [31, 35, 36]. Temperature prijelaza Bose-Einsteinovog kondenzata i suprafluidnost nisu nužno iste. Jednočestična matrica gustoće, $n(r)$, razvija beskonačno dug rep ispod Bose-Einsteinove temperature prijelaza i visina repa, tj. iznos od $n(r)$ za beskonačni r, odgovara udjelu Bose-Einsteinovog kondenzata, n_0.

Interes se brzo proširio i na dvodimenzionalne sustave koji su znatno drugačiji [37, 38]. Tako, naprimjer, udio suprafluida u dvodimenzionalnom sustavu, kako se temperatura približava temperaturi prijelaza naglo skoči do neke konačne vrijednosti pri $T = T_c$ i nakon toga nastavlja postupno rasti kako se temperatura dalje smanjuje [38]. Za temperature veće od suprafluidne temperature prijelaza, $T > T_c$, asimptotski dugodosežni rep jednočestične matrice gustoće, $n(r)$, eksponencijalno opada s udaljenošću r. Za $T < T_c$ rep jednočestične matrice gustoće opada algebarski što odražava dugodosežne korelacije i može se opisati izrazom

$$n(r) \sim r^{-\eta(T)}. \tag{1}$$

Pri temperaturama većim od T_c, ali blizu T_c, jednočestična matrica gustoće opada algebarski s udaljenošću r, ali do nekog konačnog r nakon kojeg opada eksponencijalno. Takva ovisnost jednočestične matrice gustoće odražava početak lokalnog uređenja sustava blizu T_c. Po Kosterlitz-Thouless teoriji [37] temperatura prijelaza, T_c, može se procijeniti iz jednočestične matrice gustoće kao temperatura pri kojoj eksponent $\eta(T)$ iz izraza (1) ima vrijednost $\eta(T) = 0.25$. Pri $T = 0$, $\eta \to 0$ i jednočestična matrica gustoće je konstantna kao i u trodimenzionalnom sustavu.

Dimenzionalnost se kvantnog sustava eksperimentalno postiže različitim postavcima. Tako se trodimenzionalni sustavi postižu zarobljavanjem u sferičnim potencijalima, dok se dvodimenzionalnost postiže postavljanjem tankih slojeva na različite površine [39, 40] ili u potencijalima koji omogućuju gibanje samo u dvije dimenzije. Također, dvodimenzionalni se sustav može kreirati u obliku cilindra na unutarnjim površinama nanopora [41]. Jednodimenzionalni

se sustav postiže, kao što smo već diskutirali, postavljanjem bozona u jako uske nanopore ili optičke zamke u kojima je moguće gibanje samo u jednoj dimenziji.

Del Maestro i Affleck [42] su pomoću estimatora namotaja unutar PIMC-a proračunali ovisnost udjela suprafluida jednodimenzionalnog sustava atoma o umnošku duljine i temperature koja se poklapa s predviđanjima LL teorije uz mala odstupanja. Suprafluidnost je proučena u nanoporama većeg radijusa, u kojima se pojavljuju cilindri helijevih atoma, tj. dvodimenzionalni slojevi u obliku cilindra [24]. U nanoporama radijusa $R = 3$ Å, ^{4}He očito pokazuje svojstva jednodimenzionalnog sustava što je vidljivo iz ovisnosti udjela suprafluida i jednočestične matrice gustoće koje se poklapaju s predviđanjima LL teorije [25, 26]. Pri većim radijusima, pri kojima se pojavljuju cilindrični slojevi, jednočestična matrica gustoće pokazuje karakteristike dvodimenzionalnog sustava [25]. Međutim, nepoznato je kako dimenzionalnost sustava ovisi o linijskoj gustoći, odnosno je li moguće za fiksni vanjski potencijal uočiti u nekim fizikalnim veličinama poput suprafluidnosti promjenu ponašanja koja bi ukazivala na promjenu efektivne dimenzionalnosti sustava.

Naš cilj u ovom dijelu istraživanja je ispitati prijelaz ^{4}He iz 1D u 2D povećanjem linijske gustoće. Promatrat ćemo tekući ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å. Proučit ćemo ovisnost udjela suprafluida i korelacijskih funkcija u ovisnosti o temperaturi i gustoći te ih usporediti s očekivanim ponašanjem za jednodimenzionalne i dvodimenzionalne slučajeve.

1.3 Dvokomponentne bozonske mješavine u harmoničkoj zamci

Mješavine kvantnih tekućina omogućavaju proučavanje efekata koji proizlaze iz interakcija među komponentama i interakcija unutar iste komponente. Takva istraživanja doprinose razumijevanju fundamentalnih fenomena kao što je Bose-Einsteinova kondenzacija i suprafluidnost. Prirodno prisutna mješavina helija ^{3}He-^{4}He je nekoliko desetljeća bila u fokusu istraživanja jer prirodno prisutne bozonske mješavine nisu dostupne. Degenerirani dvokomponentni bozonski sustavi ultrahladnih atoma koji se mogu postići hvatanjem dviju hiperfinih komponenti istog elementa, [43–45] različitih izotopa [46–48] ili različitih elementata [49–58] pokazali su se kao odlična platforma za proučavanje raznih fizikalnih efekata kao što je postizanje mješavine s dualnim Bose-Einsteinovim kondenzatom te proučavanje prijelaza iz miješanog u separirani

režim. Također, veliku ulogu imaju i Fesbachove rezonance kojima je moguće mijenjati i namještati interakcije atoma pojedinih komponenti [59, 60].

Mješavine odbojnih ultrahladnih bozonskih plinova unutar harmoničke zamke mogu biti u miješanom ili separiranom režimu. Režim u kojem će mješavina biti ovisi o interakcijama između atoma unutar iste vrste i o interakcijama između dvije vrste, o omjerima mase dviju komponenti, o broju atoma kao i o omjeru broja atoma u mješavini [61–66]. Separacija se dviju komponenti može manifestirati na dva načina: separacija u dvije nakupine ili na način da je jedna komponenta u sredini i okružena drugom komponentom u obliku ljuske. Dvije se nakupine mogu ilustrirati kao dva grumenčića ili grudvice koje se dodiruju. Dakle, dvije nakupine nisu sferno simetrične.

Dva su važna aspekta u eksperimentalnom proučavanju ultrahladnih plinova. To su kontrola međuatomskih interakcija pomoću Feshbachovih rezonanci i precizna manipulacija vanjskog potencijala pomoću lasera i magnetskih polja [1]. Kako promatramo sustave pri ultrahladnim temperaturama, de Broglieva valna duljina atoma u zamkama je puno veća od dosega interakcija tako da su atomski sudari izotropni i mogu se opisati samo jednim parametrom: s-valnom duljinom raspršenja, a. Sustavi atoma koje promatramo imaju jako malu gustoću - $10^{12} - 10^{14}$ atoma po cm^3 [67]. Dosadašnji se teorijski opis ovakvih sustava uglavnom temelji na rješavanju Gross-Pitaevskii jednadžbe, aproksimaciji srednjeg polja [68]. Drugim riječima, potencijal u kojem se nalazi svaki atom aproksimira se kao srednji potencijal ostalih $N-1$ atoma. Gross-Pitaevskii se opis pokazao pouzdanim jer su promatrani sustavi niske gustoće.

U ref. [64] su autori usporedili predviđanja dvokomponentnih sustava u trodimenzionalnom harmoničkom potencijalu koja slijede iz Gross-Pitaevskii opisa i DMC opisa. Zaključili su da se predviđanja poklapaju po pitanju uvjeta miješanog ili separiranog režima dok se predviđanja za profile gustoća razlikuju za određene odabire parametara kao što je omjer mase, m_1/m_2 i umnožak broja atoma i duljine raspršenja, Na. No predviđanje hoće li sustav biti u miješanom ili separiranom režimu univerzalno je ako se promatra sustav s istim Gross-Pitaevskii parametrom skaliranja, Na, [64] predstavljenim u jedinicama duljine harmoničkog oscilatora l_{ho},

$$l_{\mathrm{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \tag{2}$$

Posljednjih su godina poseban interes privukla istraživanja bozonskih mješavina s privlačnim interakcijama između vrsta, a odbojnim interakcijama unutar vrste. Po teoriji srednjeg polja bozonska mješavina dvije vrste će se urušiti ako je privlačnost između atoma različite vrste veća od geometrijske sredine odbojnosti unutar atoma iste vrste,

$$g_{12}^2 > g_{11}g_{22}. \tag{3}$$

Petrov [69] je 2015. godine uočio da bozonska mješavina dvije vrste može biti stabilna i u slučaju kada to nije zadovoljeno zbog Lee-Huang-Yang (LHY) korekcije na teoriju srednjeg polja. Predviđanje je eksperimentalno potvrđeno [70–72]. Neka istraživanja ukazuju na ovisnost o detaljima međuatomskih interakcija što upućuje na korekcije teorije srednjeg polja pa čak i iznad LHY korekcije [73–79]. Uočeno je da je LHY korekcija dovoljno dobra samo za jako niske gustoće i ako je doseg interakcija mali [75].

Dakle, eksperimentalno je moguće proučavati dvojni Bose-Einsteinov kondenzat zarobljenog ultrahladnog plina ili kvantnih kapljica. Nije međutim poznata veza međusobnog utjecaja komponenti i veze suprafluidnosti i Bose-Einsteinovog kondenzata dvokomponentnih mješavina pri apsolutnoj nuli kao i pri konačnim temperaturama. Jednokomponentni alkalski ultrarijetki plinovi su skoro 100 % kondenzirani u limesu niske temperature što prati i suprafluidnost. ^{4}He je potpuno suprafluidan u limesu niske temperature, a samo 7 % kondenziran zbog jakih međuatomskih interakcija [80]. Cilj nam je bio proračunati temperaturnu ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za tri karakteristična režima dvokomponentnog bozonskog sustava te usporediti profile gustoća s DMC-om i GP predviđanjima.

Ovaj je rad organiziran na sljedeći način. U drugom poglavlju predstavljena je metodologija kvantnih Monte Carlo metoda, u trećem poglavlju su predstavljeni naši rezultati proračuna jednodimenzionalnog jako interagirajućeg bozonskog sustava u jednoj dimenziji. U četvrtom poglavlju razmatramo prijelaz ^{4}He iz jednodimenzionalnog u dvodimenzionalni sustav unutar nanopore. Rezultati proračuna dvokomponentnih bozonskih sustava zarobljenih u harmoničkoj zamci predstavljeni su u petom poglavlju. U Zaključku su izneseni glavni rezultati rada te predloženi pravci budućih istraživanja.

2 KVANTNE MONTE CARLO METODE

Kvantne Monte Carlo (QMC) metode pokazale su se pouzdanima za određivanje stacionarnih svojstava atoma, molekula, tekućina, krutina i različitih modela. Radi se o stohastičkoj metodologiji, koja se temelji na upotrebi slučajnih brojeva, prilagođenoj određivanju ravnotežnih svojstava osnovnog i pobuđenih stanja raznih kvantnih sustava pri temperaturi $T = 0$ K ili pri konačnim temperaturama. Nedavno je Pollet [81] dao pregled razvoja metoda i njihovih primjena u polju ultrahladnih plinova. Dobiveni se rezultati izvrsno slažu s eksperimentima što je također naglašeno u nedavnom revijalnom članku Nature Insight o kvantnim simulacijama ultrahladnih kvantnih plinova [82]. U ovom radu posebno ćemo koristiti kontinuum QMC metode, prilagođene kako za temperature apsolutne nule tako i za konačne temperature. Važno je istaknuti da se svojstva osnovnog stanja višečestičnih bozonskih sustava mogu izračunati direktno, do na statističku grešku koja se skalira kao inverzni drugi korijen od broja neovisnih uzoraka.

2.1 Metropolis algoritam

Prvo ćemo predstaviti Metropolis algoritam. Uveli su ga Nicholas Metropolis i njegovi suradnici 1953. godine [83]. Metropolis algoritam predstavlja poseban oblik metode značajnog odabira u kojem se neki mogući pokušaji uzorkovanja odbacuju.

Najčešće ga koristimo za generiranje slučajnih uzoraka distribuiranih po proizvoljnoj raspodjeli vjerojatnosti, $\rho(\mathbf{x})$, što omogućava računanje srednjih vrijednosti različitih fizikalnih veličina danih višedimenzionalnim integralima

$$\langle O \rangle = \frac{\int O(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})d\mathbf{x}}{\int \rho(\mathbf{x})d\mathbf{x}}, \tag{4}$$

gdje je $\rho(\mathbf{x})$ neka gustoća vjerojatnosti koja ne mora biti normirana, a $\langle O \rangle$ srednja vrijednost neke fizikalne veličine, dok $\mathbf{x}$ općenito predstavlja višedimenzionalne koordiante.

U ravnotežnom je stanju vjerojatnost pomaka $\mathbf{x} \to \mathbf{x}'$, $P(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$, takva da je u svakoj točki prostora zadovoljen uvjet [84]

$$\rho(\mathbf{x})P(\mathbf{x} \to \mathbf{x}') = \rho(\mathbf{x}')P(\mathbf{x}' \to \mathbf{x}). \tag{5}$$

Točka $\mathbf{x}$ predstavlja točku prostora $\mathbb{R}^n$ ili točku bilo kojeg drugog prostora u kojem provodimo integraciju. Uvjet (5) je poznat kao princip detaljne ravnoteže (*detailed balance*).

Vjerojatnost pomaka, $P(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$, uobičajeno se rastavlja kao

$$P(\mathbf{x} \to \mathbf{x}') = T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}'), \tag{6}$$

gdje je $T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ *a priori* distribucija uzorkovanja ili vjerojatnost pokušaja pomaka, $\mathbf{x} \to \mathbf{x}'$, a $A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ je vjerojatnost prihvaćanja pomaka. Općenito je $T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ proizvoljan, a $A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ određuje iz $T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ tako da je zadovoljen uvjet (5). Jednostavan način koji to omogućava je

$$A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}') = \min\left[1; \frac{T(\mathbf{x}' \to \mathbf{x})\rho(\mathbf{x}')}{T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')\rho(\mathbf{x})}\right]. \tag{7}$$

Uglavnom se koristi simetrični model, $T(\mathbf{x} \to \mathbf{x}') = T(\mathbf{x}' \to \mathbf{x})$ pa izraz (5) postaje

$$A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}') = \min\left[1; \frac{\rho(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x})}\right]. \tag{8}$$

Prihvaćanje pomaka iz točke $\mathbf{x}$ u točku $\mathbf{x}'$ postiže se tako da se pomak prihvaća ako je $\rho(\mathbf{x}') \geq \rho(\mathbf{x})$. U suprotnom se prihvaća s vjerojatnošću $\rho(\mathbf{x}')/\rho(\mathbf{x})$ što se ostvaruje tako da se generira $\eta \in [0,1]$ slučajni broj iz uniformne raspodjele te se pomak prihvaća ako je omjer $\rho(\mathbf{x}')/\rho(\mathbf{x}) > \eta$

$$\frac{P(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')}{P(\mathbf{x}' \to \mathbf{x})} = \frac{\rho(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x})} > \eta, \tag{9}$$

Da bismo izračunali integral (4), prvo odaberemo početnu točku $\mathbf{x}$ za koju je $\rho(\mathbf{x})$ značajna, tj. vjerojatnost da se sustav nalazi u konfiguraciji koju opisujemo točkom $\mathbf{x}$ značajna. Zatim odredimo probnu točku $\mathbf{x}'$ takvu da je

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x} \tag{10}$$

i Metropolis algoritmom (9) određujemo hoće li biti prihvaćena. U izrazu (10), komponente Δx_i biramo iz uniformne raspodjele na intervalu $[-d_i, d_i]$. Najčešće biramo

$$d_i = d; \forall i. \tag{11}$$

Ako, naprimjer, promatramo sustav u kojem je skala duljine u jednom smjeru veća od drugih, za taj smjer možemo odabrati proporcionalno veću maksimalnu duljinu koraka d_i, ali

ne nužno.

Ako je maksimalna duljina koraka d prevelika, rijetko će se dogoditi prihvaćanje probne točke $\mathbf{x}'$ jer je u praksi velika vjerojatnost da će $\rho(\mathbf{x}')$ biti manji od $\rho(\mathbf{x})$ za velike $\Delta\mathbf{x}$. Ako je probni pomak rijetko prihvaćen, simulacija je neefikasna i nakupljaju se pristrane procjene opservabli te se ne uzorkuje prostor konfiguracija. S druge strane, ako je maksimalna duljina koraka d premala, prečesto će se prihvaćati probna točka. Ako je probni pomak prečesto prihvaćen, simulacija je vremenski neefikasna i ne uzorkuju se konfiguracije koje su manje vjerojatne. Optimalno se uzorkovanje postiže ako je omjer broja prihvaćenih i odbijenih probnih točaka oko 50 % tako da se u skladu s tim bira iznos maksimalne duljine koraka d. Optimalni udio prihvaćenih pomaka nije nužno oko 50 %. U pravilu je potrebno testirati i provjeriti efikasnost za svaku metodu i za svaki sustav koji se simulira.

Metropolis algoritam ima dvije slabosti. Uzorkovanje je ispravno samo asimptomatski i dva susjedna uzorkovanja su korelirana. Prva slabost se eliminira ekvilibracijom sustava, a druga blokiranjem. Više o tome u poglavlju 2.4.5.

2.2 Varijacijski Monte Carlo

Varijacijski Monte Carlo (VMC) metoda je kojom se stohastičkom integracijom, uz pomoć Metropolis algoritma, primjenom varijacijskog principa računa gornja granica energije, najčešće osnovnog stanja, sustava. Neka je sustav koji promatramo opisan hamiltonijanom H koji ima svojstvena stanja $|\phi_n\rangle$ s pripadajućim svojstvenim energijama E_n, $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$.

Prema varijacijskom principu znamo

$$\begin{aligned}
\langle\Phi|H|\Phi\rangle &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle\phi_n|H|\phi_m\rangle \\
&= \sum_{n,m} c_n^* c_m E_m \langle\phi_n|\phi_m\rangle \\
&= \sum_{n,m} c_n^* c_m E_m \delta_{mn} \\
&= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq \sum_n |c_n|^2 E_0 = E_0,
\end{aligned} \tag{12}$$

gdje je E_0 energija osnovnog stanja, a $|\Phi\rangle$ proizvoljna probna valna funkcija koja se može razviti

u red svojstvenih stanja hamiltonijana

$$|\Phi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle. \tag{13}$$

Dakle, očekivana vrijednost hamiltonijana u stanju $|\Phi\rangle$ uvijek je veća od energije osnovnog stanja, osim ako je probna valna funkcija upravo osnovno stanje. Cilj nam je varirajući probnu valnu funkciju $|\Phi\rangle$ pronaći najnižu energiju, tj. odrediti gornju granicu energije osnovnog stanja.

Ako probna valna funkcija $|\Phi\rangle$ ovisi o parametrima α_i, tada i očekivana vrijednost energije u stanju $|\Phi\rangle$ ovisi o parametrima α_i

$$E[\alpha_1, \alpha_2, \dots] = \frac{\langle \Phi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)|H|\Phi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)\rangle}{\langle \Phi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)|\Phi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)\rangle}. \tag{14}$$

Zapis integrala (14) za očekivanu vrijednost energije možemo prilagoditi kako bi bio pogodan za računanje pomoću Metropolis algoritma

$$E[\alpha_1, \alpha_2, \dots] = \int \rho(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) E(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) d\mathbf{R}, \tag{15}$$

gdje je

$$\rho(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) = \frac{|\Phi(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots)|^2}{\int |\Phi(\mathbf{R}', \alpha_1, \alpha_2, \dots)|^2 d\mathbf{R}'} \tag{16}$$

funkcija raspodjele vjerojatnosti, a

$$E(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) = \frac{H\Phi(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots)}{\Phi(\mathbf{R}, \alpha_1, \alpha_2, \dots)} \tag{17}$$

lokalna energija.

Cilj je pronaći parametre α_i za koje je očekivana vrijednost energije, $E[\alpha_1, \alpha_2, \dots]$, minimalna. Za svaki izbor parametara α_i integral (15) računamo Metropolis algoritmom i variranjem parametara procjenjujemo minimalnu energiju.

Nedostatak ove metode je što moramo znati analitički oblik valne funkcije osnovnog stanja kako bismo izračunali gornju granicu energije osnovnog stanja. Također, pri minimizaciji treba voditi računa i o mogućem upadanju u lokalni minimum. Usprkos navedenom ograničenju

često je moguće dobiti i na VMC razini kvalitetne rezultate. U ovom se radu međutim VMC koristi kako bi se dobila optimizirana valna funkcija, koja je onda optimalan izbor za probnu valnu funkciju DMC-a. Valna funkcija dobivena VMC-om optimalan je izbor za probnu valnu funkciju DMC-a.

2.3 Difuzijski kvantni Monte Carlo

Difuzijski Monte Carlo (DMC) metoda je kojom je moguće procijeniti, do na statističku grešku, egzaktno rješenje Schrödingerove jednadžbe

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{R},t)}{\partial t} = H\Psi(\mathbf{R},t), \tag{18}$$

za osnovno stanje bozonskih sustava. Ono se općenito može zapisati u obliku $\Psi(R,t) = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\psi(R,0)$. Razvojem $\Psi(R,0)$ po svojstvenim stanjima hamiltonijana $\Psi(R,0) = \sum c_n\phi_n(R)$ i uvrštavanjem u prethodni izraz dobivamo

$$\Psi(\mathbf{R},t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\phi_n(\mathbf{R}), \tag{19}$$

gdje su $\phi_n(\mathbf{R})$ i E_n rješenja vremenski neovisne Schrödingerove jednadžbe

$$H\phi_n(\mathbf{R}) = E_n\phi_n(\mathbf{R}). \tag{20}$$

Ako translatiramo skalu energija na sljedeći način

$$H \to H - E_\mathrm{R} \quad i \quad E \to E - E_\mathrm{R} \tag{21}$$

gdje je E_R proizvoljna referentna energija i transformiramo vrijeme iz realnog u imaginarno, tj. napravimo supstituciju

$$\tau = i\frac{t}{\hbar}, \tag{22}$$

Schrödingerova jednadžba (18) postaje

$$\frac{\partial\Psi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = -(H - E_\mathrm{R})\Psi(\mathbf{R},\tau). \tag{23}$$

Nakon transformacija (21) i (22), rješenje (19) postaje

$$\Psi(\mathbf{R},\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{-(E_n - E_\mathrm{R})\tau} \phi_n(\mathbf{R}). \tag{24}$$

Primijetimo da ovisno o izboru referentne energije E_R postoje tri slučaja asimptotskog ponašanja valne funkcije (24) u limesu beskonačno dugog simulacijskog vremena, $\tau \to \infty$:

(1) $E_\mathrm{R} > E_0$; $\lim_{\tau\to\infty} \Psi(\mathbf{R},\tau) = \infty$: $\Psi(\mathbf{R},\tau)$ eksponencijalno divergira

(2) $E_\mathrm{R} < E_0$; $\lim_{\tau\to\infty} \Psi(\mathbf{R},\tau) = 0$: $\Psi(\mathbf{R},\tau)$ eksponencijalno opada

(3) $E_\mathrm{R} = E_0$; $\lim_{\tau\to\infty} \Psi(\mathbf{R},\tau) = c_0\phi_0(\mathbf{R})$: $\Psi(\mathbf{R},\tau)$ konvergira u osnovno stanje,

gdje je E_0 energija osnovnog stanja.

Dakle, izborom $E_\mathrm{R} = E_0$, valna će funkcija $\Psi(\mathbf{R},\tau)$ konvergirati u osnovno stanje, bez obzira na početni izbor oblika funkcije, kad god postoji značajno preklapanje između $\Psi(\mathbf{R},0)$ i $\phi_0(\mathbf{R})$, tj. kad god je c_0 dovoljno velik. Najčešće se za $\Psi(\mathbf{R},0)$ uzima funkcija $\Phi(\mathbf{R})$ izračunata varijacijskom Monte Carlo metodom.

Ovakav oblik DMC-a nije efikasan i vodi do velike fluktuacije broja šetača jer šetači mogu ulaziti u područja u kojima potencijal ima nagli rast, što znači da se mora stvarati i uništavati veliki broj šetača u svakom koraku. Pomnožimo li Schrödingerovu jednadžbu (23) u formi imaginarnog vremena s desna s početnim oblikom probne valne funkcije $\Psi(\mathbf{R},0) = \Phi(\mathbf{R})$, dobivamo jednadžbu za $f(\mathbf{R},\tau) = \Phi(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{R},\tau)$ [84]

$$\frac{\partial f(\mathbf{R},\tau)}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 f(\mathbf{R},\tau) - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla[F(\mathbf{R})f(\mathbf{R},\tau)] - [E(\mathbf{R}) - E_\mathrm{R}]f(\mathbf{R},\tau), \tag{25}$$

gdje je $F(\mathbf{R}) = 2\frac{\nabla\Phi(\mathbf{R})}{\Phi(\mathbf{R})}$ vanjska sila u difuzijskom procesu koji odvlači difuzijski proces u područja gdje je $\psi(\mathbf{R})$ značajna, a $E(\mathbf{R}) = \frac{H\Phi(\mathbf{R})}{\Phi(\mathbf{R})}$ lokalna energija. Jasno je da na vremensku evoluciju od $f(\mathbf{R},\tau)$ utječu tri efekta: difuzijski dio koji uključuje ∇^2, driftni dio koji uključuje $F(\mathbf{R})$ i treći član koji opisuje efekt izvora ili ponora, $E(\mathbf{R}) - E_\mathrm{R}$.

Promjena funkcije $f(\mathbf{R},\tau)$ kroz mali vremenski korak $\Delta\tau$, u slučaju algoritma drugog reda koji se koristi u ovom radu, može se zapisati u integralnom obliku [85]

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{R}', \tau + \Delta\tau) &= \int G_3\left(\mathbf{R}', \mathbf{R}_1, \frac{\Delta\tau}{2}\right) G_2\left(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \frac{\Delta\tau}{2}\right) G_1\left(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \Delta\tau\right) \\
&\times G_2\left(\mathbf{R}_3, \mathbf{R}_4, \frac{\Delta\tau}{2}\right) G_3\left(\mathbf{R}_4, \mathbf{R}, \frac{\Delta\tau}{2}\right) f(\mathbf{R}, \tau) d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 d\mathbf{R}_3 d\mathbf{R}_4 d\mathbf{R} \quad (26)
\end{aligned}
$$

gdje je

$$
G_1(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \tau) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\tau\right)^{3N/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{R}-\mathbf{R}')^2}{2\hbar^2\tau/m}\right) \quad (27)
$$

ekvivalentno $3N$ dimenzionalnom Gaussijanu koji se širi tijekom vremena τ. Druga Greenova funkcija opisuje pojavu driftne sile

$$
G_2(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \tau) = \delta(\mathbf{R}' - \mathbf{R}(\tau)), \quad (28)
$$

gdje je $\mathbf{R}(\tau)$ rješenje jednadžbe

$$
\frac{d\mathbf{R}(\tau)}{d\tau} = \frac{\hbar^2}{2m} F(\mathbf{R}(\tau)) \quad (29)
$$

koje zadovoljava početni uvjet $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}$. Driftna sila odvlači difuzijski proces u značajnija područja. Treća Greenova funkcija opisuje proces stvaranja i uništavanja šetača

$$
G_3(\mathbf{R}', \mathbf{R}, \tau) = \exp\left(-(E_L(\mathbf{R}) - E_{\mathrm{R}})\tau\right) \delta(\mathbf{R}' - \mathbf{R}). \quad (30)
$$

Treći je član ključan za DMC jer stvara ili uništava šetače ovisno o razlici $E(\mathbf{R}) - E_{\mathrm{R}}$. Šetači s nižom lokalnom energijom od referentne umnažaju se dok se oni s većom uništavaju. Detalji generiranja nove konfiguracije R' iz konfiguracije R opisani su u ref. [86].

Energiju usrednjavamo po šetačima koji su raspodijeljeni po distribucijskoj funkciji $f(\mathbf{R}, \tau) = \Phi(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{R}, \tau)$

$$
E(\tau) = \frac{\int E(\mathbf{R}) f(\mathbf{R}, \tau) d\mathbf{R}}{\int f(\mathbf{R}, \tau) d\mathbf{R}}. \quad (31)
$$

U limesu beskonačnog imaginarnog vremena τ imamo

$$
\lim_{\tau\to\infty} f(\mathbf{R}, \tau) = \Phi(\mathbf{R})\phi_0(\mathbf{R}), \quad (32)
$$

a time i

$$\lim_{\tau\to\infty} E(\tau) = E_0. \tag{33}$$

Konačno rješenje ne ovisi o probnoj valnoj funkciji $\Phi(\mathbf{R})$ dok god postoji preklapanje s valnom funkcijom osnovnog stanja. No lošim odabirom probne valne funkcije, simulacija može trajati predugo.

2.4 Monte Carlo Integral po stazama (PIMC)

PIMC (Monte Carlo integral po stazama, *Path Integral Monte Carlo*) je jedina poznata metoda koja, za bozonske sustave, može u principu dati egzaktne numeričke procjene fizikalnih opservabli pri konačnim temperaturama, uključujući udio suprafluida i udio Bose-Einsteinovog kondenzata. Metoda se temelji na Feynmanovom opisu integracije po stazama imaginarnog vremena. Pregled izvornog oblika metode, koji su osmislili Ceperley i Pollock, dan je u ref. [35].

Promotrimo sustav s konstantnom temperaturom, T, nepromjenjivim brojem čestica, N, i konstantnim volumenom, V, opisan hamiltonijanom H. Neka su $|\phi_i\rangle$ svojstvena stanja, a E_i svojstvene vrijednosti hamiltonijana H. Tada je vjerojatnost, w_i, da se sustav nalazi u stanju $|\phi_i\rangle$ dana izrazom

$$w_i = \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_i}}{\sum_i \mathrm{e}^{-\beta E_i}}, \tag{34}$$

gdje je $\beta = 1/k_B T$, a

$$Z = \sum_i \mathrm{e}^{-\beta E_i} = \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta H}) \tag{35}$$

particijska funkcija Z.

Matrica se gustoće,

$$\rho = \sum_i w_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \tag{36}$$

tada može zapisati kao

$$\rho = \frac{1}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \sum_i e^{-\beta E_i} |\phi_i\rangle\langle\phi_i|. \tag{37}$$

Kako su $|\phi_i\rangle$ svojstvena stanja, a E_i svojstvene vrijednosti operatora H, tj. kako je

$$H|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle, \tag{38}$$

matrica se gustoće, ρ, može zapisati kao

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H})}. \tag{39}$$

Pritom smo iskoristili svojstvo potpunosti baze $|\phi_i\rangle$,

$$\sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = I. \tag{40}$$

Očekivana se vrijednost nekog operatora O može izraziti u obliku

$$\langle O\rangle = \mathrm{tr}(O\rho) \tag{41}$$

ili u koordinatnoj reprezentaciji u obliku

$$\langle O\rangle = \int d\mathbf{R}\langle\mathbf{R}|O\rho|\mathbf{R}\rangle, \tag{42}$$

gdje je $\mathbf{R} = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N\}$.

Ako u izraz (42) između dva operatora uvrstimo izraz za jedinični operator oblika

$$I = \int d\mathbf{R}'|\mathbf{R}'\rangle\langle\mathbf{R}'|, \tag{43}$$

slijedi da je očekivana vrijednost operatora O

$$\langle O\rangle = \int d\mathbf{R}d\mathbf{R}'\rho(\mathbf{R},\mathbf{R}';\beta)\langle\mathbf{R}|O|\mathbf{R}'\rangle, \tag{44}$$

gdje je $\rho(\mathbf{R},\mathbf{R}';\beta)$ matrica gustoće u koordinatnoj reprezentaciji i može se zapisati kao

$$\rho(\mathbf{R},\mathbf{R}';\beta) = \sum_i w_i\phi_i(\mathbf{R})\phi_i^*(\mathbf{R}'). \tag{45}$$

Ključna činjenica za PIMC formalizam svojstvo je matrice gustoće da je produkt dvije matrice gustoće opet matrica gustoće:

$$\mathrm{e}^{-(\beta_1+\beta_2)H} = \mathrm{e}^{-\beta_1 H}\mathrm{e}^{-\beta_2 H} \tag{46}$$

što u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$\rho(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_3;\beta_1+\beta_2) = \int d\mathbf{R}_2 \rho(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2;\beta_1)\rho(\mathbf{R}_2,\mathbf{R}_3;\beta_2). \tag{47}$$

Svojstvo produkta dvije matrice gustoće možemo primijeniti M puta. Produkt M matrica gustoće za sustav pri temperaturi MT jednak je matrici gustoće pri temperaturi T:

$$\left(\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{M}H}\right)^M = \mathrm{e}^{-\beta H} \tag{48}$$

gdje β/M možemo definirati kao vremenski korak τ. Izraz (48) u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$\rho(\mathbf{R}_0,\mathbf{R}_M;\beta) = \int\cdots\int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \ldots d\mathbf{R}_{M-1}\rho(\mathbf{R}_0,\mathbf{R}_1;\tau)\rho(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2;\tau)\ldots\rho(\mathbf{R}_{M-1},\mathbf{R}_M;\tau). \tag{49}$$

Matricu gustoće, ρ, općenito možemo interpretirati kao operator evolucije u imaginarnom vremenu $t = i\beta$ [87], a time izraz (49) možemo interpretirati kao evoluciju od početne konfirguracije $\mathbf{R}_0$ do konačne $\mathbf{R}_M$ u imaginarnom vremenu. Ako je M neki konačni broj, putanja $\{\mathbf{R}_0\ldots\mathbf{R}_M\}$ je diskretizirana. U limesu malog vremenskog koraka $\tau \to 0$, odnosno beskonačnog broja točki $M \to \infty$ putanja postaje kontinuirana. Do sada nije korištena nikakva aproksimacija što znači da je izraz (49) egzaktan za $M \geq 1$.

Akcija sustava S definira se kao negativni logaritam egzaktne matrice gustoće i može se izraziti kao suma akcija S^i

$$S = \sum_{i=1}^{M} S^i = \sum_{i=1}^{M} S(\mathbf{R}_{i-1},\mathbf{R}_i;\tau) = -\sum_{i=1}^{M} \ln[\rho(\mathbf{R}_{i-1},\mathbf{R}_i;\tau)]. \tag{50}$$

Kombinacijom izraza (49) i (50) slijedi egzaktni izraz za integral po stazama

$$\rho(\mathbf{R}_0,\mathbf{R}_M;\beta) = \int\cdots\int d\mathbf{R}_1\ldots d\mathbf{R}_{M-1}\exp\left[-\sum_{i=1}^{M} S(\mathbf{R}_{i-1},\mathbf{R}_i;\tau)\right]. \tag{51}$$

Ako hamiltonijan sustava, H, rastavimo na kinetički i potencijalni dio, $H = K+V$, matrica gustoće može se razviti pomoću Baker–Campbell–Hausdorff formule na oblik

$$e^{-\tau(K+V)} = e^{-\tau K} e^{-\tau V} e^{-\frac{\tau^2}{2}[K,V]} e^{-\frac{\tau^3}{6}(2[V,[K,V]]+[K,[K,V]])} \ldots . \tag{52}$$

Ako pretpostavimo da $M \to \infty$, vremenski korak, τ, će biti mali i sve komutatore u izrazu (52) možemo zanemariti. Dakle, u pretpostavci malog vremenskog koraka izraz (52) postaje

$$e^{-\tau(K+V)} \approx e^{-\tau K} e^{-\tau V}. \tag{53}$$

Prethodni je izraz poznat kao primitivna aproksimacija. No važno je napomenuti da je Trotter [88] dokazao konvergenciju

$$e^{-\beta(K+V)} = \lim_{M\to\infty} \left(e^{-\tau K} e^{-\tau V}\right)^M. \tag{54}$$

Trotterova je formula garancija da se neće nagomilavati greška zbog primitivne aproksimacije u limesu kad $\tau \to 0$. Primitivna aproksimacija je dovoljna za egzaktne proračune, ali ograničava nas računalna zahtjevnost jer korak τ mora biti u limesu $\tau \to 0$. Korištenjem viših redova iz izraza (52) može se postići precizniji proračun za veći vremenski korak u odnosu na onaj koji bi bio potreban s primitivnom aproksimacijom, a time povećati vremensku efikasnost proračuna.

Primitivna aproksimacija (53) u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$\rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_2; \tau) \approx \int d\mathbf{R}_1 \langle \mathbf{R}_0 | e^{-\tau K} | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\tau V} | \mathbf{R}_2 \rangle. \tag{55}$$

Sada se vratimo na izraz (51). Akciju sustava određuju oba dijela hamiltonijana: kinetički i potencijalni dio. Dio akcije, S^i, koji određuje kinetički dio može se egzaktno izračunati [35]

$$K^i = \frac{3N}{2} \ln(4\pi\lambda\tau) + \frac{(\mathbf{R}_{i-1} - \mathbf{R}_i)^2}{4\lambda\tau}, \tag{56}$$

gdje je $\lambda = \hbar^2/2m$.

Što se tiče dijela akcije, S^i, koji određuje potencijalni dio hamiltonijana, po primitivnoj aproksimaciji je

$$V^i = \frac{\tau}{2} \left[V(\mathbf{R}_i) - V(\mathbf{R}_{i-1}) \right], \tag{57}$$

gdje je

$$V(\mathbf{R}_i) = \sum_{m<n} V(|\mathbf{r}_{m,i} - \mathbf{r}_{n,i}|) \tag{58}$$

ukupna potencijalna energija sustava pri konfiguraciji $\mathbf{R}_i$. Ovo je najjednostavnija aproksimacija uz koju je potrebno koristiti mali vremenski korak i nije moguće simulirati velike sustave koji su fizikalno zanimljiviji. Srećom, razvijene su bolje aproksimacije uz koje je moguće efikasnije simulirati veće sustave kao što su sustavi u ovom radu. Jedna od takvih aproksimacija je aproksimacija koju je uveo Boninsegni [89]:

$$V^i = \tau \left[\frac{2}{3} V(\mathbf{R}_{i-1}) + \tilde{V}(\mathbf{R}_{i-1}) \right], \tag{59}$$

gdje je

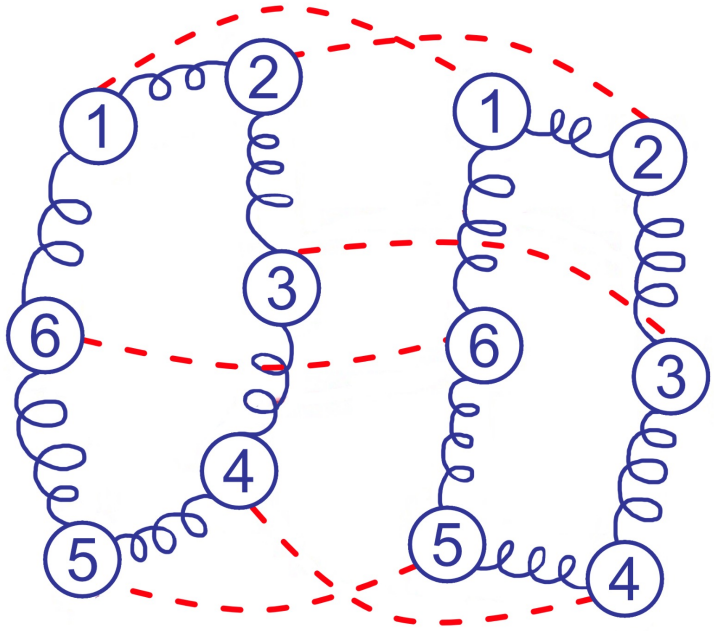
$$\tilde{V}(\mathbf{R}_i) = \begin{cases} \frac{2V(\mathbf{R}_i)}{3} + \frac{2\lambda\tau^2}{9} \sum_{j=1}^{N} [\nabla_j V(\mathbf{R}_i)]^2; & \text{za neparni } i \\ 0; & \text{za parni } i. \end{cases} \tag{60}$$

I time imamo sve što nam je potrebno kako bismo uz pomoć Metropolis algoritma procijenili integral (44), tj. očekivanu vrijednost opservable O. Naravno, rezultat je uvijek aproksimativan jer je i M konačan broj, ali moguće je s dovoljno velikim brojem koraka, odnosno dovoljno malim imaginarnim vremenskim korakom, τ, postići toliku preciznost da je sistematska greška puno manja od statističke neodređenosti procjene $\langle O \rangle$. Dakle, može se reći da je moguće pomoću PIMC-a egzaktno procijeniti očekivane vrijednosti sustava u limesu $\tau \to 0$. U praksi uzimamo dovoljno mali τ tako da je dobivena vrijednost energije unutar greške jednaka ekstrapoliranoj. Zbog toga se PIMC metoda smatra egzaktnom.

2.4.1 Interpretacija i klasični izomorfizam

Izraz za integral po stazama (51) možemo interpretirati na sljedeći način. Primijetimo da je podjelom imaginarnog vremena na M manjih dijelova, τ, sustav od N kvantnih čestica predstavljen sa M različitih konfiguracija, $\mathbf{R}_i$. To možemo zamisliti kao da smo N kvantnih čestica predstavili kao NM kvazi-klasičnih čestica ili zrnaca (*beads*) koje međusobno interagiraju po specijalnim pravilima. Svaka kvantna čestica je tada predstavljena sa M zrnaca u lancu ili polimeru. Sve kvazi-klasične čestice koje pripadaju istoj konfiguraciji $\mathbf{R}_i$ interagiraju međusobno, a zrnca iz različitih konfiguracija međusobno ne interagiraju osim ako su susjedna jedna drugoj u polimeru. Konfiguracija $\mathbf{R}_i$ pripada imaginarnom vremenu $t_i = i\tau$. Veza između susjednih zrnaca koja pripadaju istom polimeru je određena kinetičkom akcijom, K^i, a veza između

zrnaca različitih lanaca iste konfiguracije $\mathbf{R}_i$ je određena potencijalnom akcijom, V^i. Ilustracija dva polimera je prikazana na Slici 2.1.



Slika. 2.1: Ilustracija dva polimera. Ilustrirane su dvije kvantne čestice kao dva zatvorena polimera. Krugovi s brojevima predstavljaju zrnca. Zrnca s istim brojevima pripadaju istoj konfiguraciji, $\mathbf{R}_i$, i međusobna interakcija im je određena potencijalnom akcijom, V^i. Interakcija između zrnaca iste konfiguracije je predstavljena isprekidanim linijama. Opruge predstavljaju kinetičku akciju, K^i.

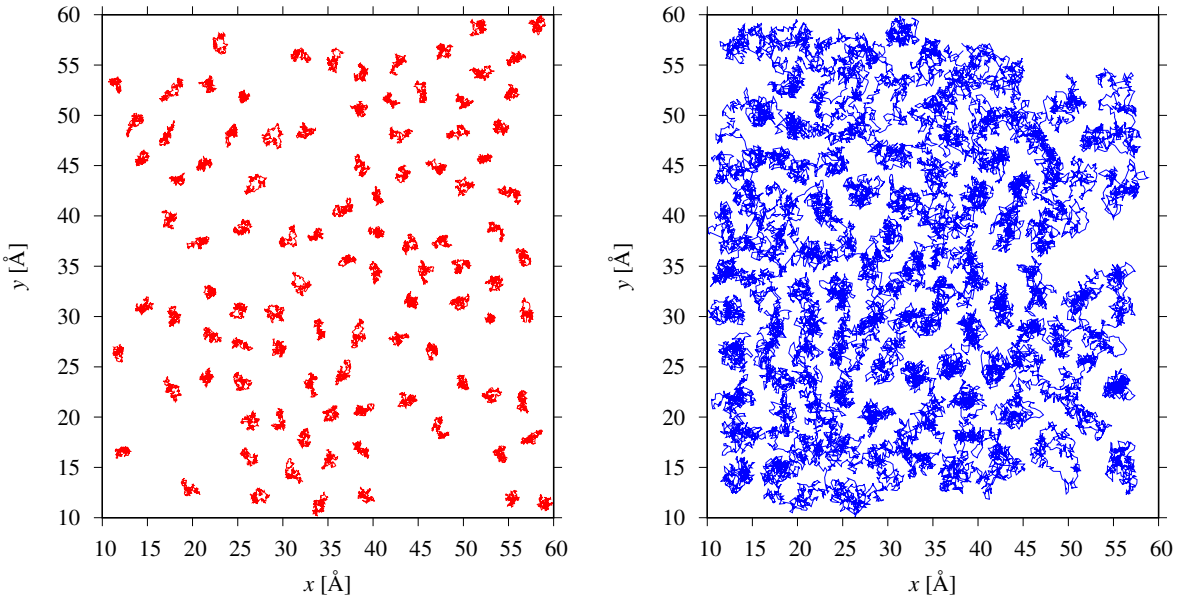
Ako pogledamo izraz (44), možemo primijetiti da prilikom usrednjavanja dijagonalne opservable O mora biti zadovoljen uvjet da su nulta i M-ta konfiguracija identične, $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_M$, tj. polimeri moraju biti zatvoreni lanci tako da je prvo i zadnje zrno identično.

Raširenost polimera možemo interpretirati kao delokalizaciju kvantne čestice. Što je temperatura kvantnog sustava, T, veća, kinetički dio akcije (56)

$$K^i \sim \frac{M k_B T}{4\lambda} (\mathbf{R}_{i-1} - \mathbf{R}_i)^2 \tag{61}$$

će jače privlačiti susjedna zrnca u polimeru. Tako će se u limesu visoke temperature svaki polimer efektivno skupiti u jedno zrno. Time kvantni sustav od N čestica nema više razlike u

odnosu na klasični sustav od N čestica. S druge strane, u limesu niske temperature, $T \to 0$, s konstantnim vremenskim korakom, τ, za opis kvantnog sustava trebamo beskonačno mnogo zrnaca koje će se zbog slabe veze između susjednih zrnaca nasumično raširiti po cijelom prostoru. Na Slici 2.2 je ilustriran helij-4 u dvodimenzionalnom sustavu pri dvije različite temperature. Pri temperaturi $T = 0.5$ K, kada je udio suprafluida 100 %, polimeri su raširenи, dok se pri višoj temperaturi, $T = 10$ K, polimeri skupljaju.



Slika. 2.2: Ilustracija 100 polimera helija-4 u dvodimenzionalnom sustavu pri $T = 10.0$ K (lijevo) i $T = 0.5$ K (desno). Raširenost polimera može se interpretirati kao delokalizacija atoma helija. U limesu visoke temperature polimeri se skupe u jednu točku.

Također primijetimo da za različite temperature kvantnog sustava koji simuliramo trebamo različiti broj zrnaca, M. Ako su polimeri skupljeniji, tj. ako je kvantna čestica manje delokalizirana, treba nam manje zrnaca za efektivan opis kvantne čestice. U slučaju niskih temperatura, kada je kvantna čestica značajno delokalizirana, treba nam više zrnaca za efektivan opis. Broj zrnaca, M, koji ćemo zadati za određenu temperaturu je određen fiksiranim imaginarnim vremenskim korakom, $\tau = \beta/M$ uz uvjet da je akcija, S, dovoljno precizna, tj. da aproksimacija akcije dovoljno dobra.

Prethodni opis PIMC metode vrijedi za čestice koje se razlikuju, tj. Boltzmannove čestice. U ovom se radu bavimo bozonskim sustavima i trebamo uzeti u obzir da se čestice ne razlikuju.

Bozonska matrica gustoće u tom slučaju mora biti simetrična i u koordinatnoj reprezentaciji ima oblik

$$\rho_B(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_1; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_p \rho(\mathbf{R}_0, \mathscr{P}\mathbf{R}_1; \beta), \tag{62}$$

gdje suma ide po svim permutacijama, a $N!$ je broj permutacija. Ako su čestice identične, rubni uvjet zatvorenih polimera je $\mathscr{P}\mathbf{R}_M = \mathbf{R}_0$, tj. polimeri se mogu i međusobno spajati u velike polimere. Dakle, u slučaju bozonskog sustava, obavezno je uzorkovati i permutacije, $\mathscr{P}\mathbf{R}_M = \mathbf{R}_0$, između polimera što procjenu srednjih vrijednosti opservabli čini sporijom pri većem broju čestica. U slučaju rezultata na Grafu 2.2 je uzeta u obzir bozonska priroda helija-4. Važno proširenje metode pojavilo se uvođenjem worm algoritma. Više o tome u idućem poglavlju.

2.4.2 Worm algoritam

Worm algoritam je detaljno predstavljen i prvi put primijenjen na PIMC simulacije u ref. [36,90]. Ova računalna shema omogućuje efikasan proračun udjela suprafluida i nedijagonalnih korelacija za sustave reda veličine veće u odnosu na konvencionalne PIMC simulacije.

Worm algoritam prostor konfiguracija dijeli na dva dijela: dijagonalni u kojem su svi polimeri zatvoreni, $\mathbf{R}_0 = \mathscr{P}\mathbf{R}_M$ i nedijagonalni u kojem su svi polimeri zatvoreni, osim jednog polimera koji je otvoren i zove se crv ili worm. Otvoreni polimer ima dva rubna zrna koja imaju samo jedno susjedno zrno i u literaturi zovu se Ira i Masha ili glava i rep. Dijagonalne kofiguracije se zovu Z-sektor, a nedijagonalne G-sektor.

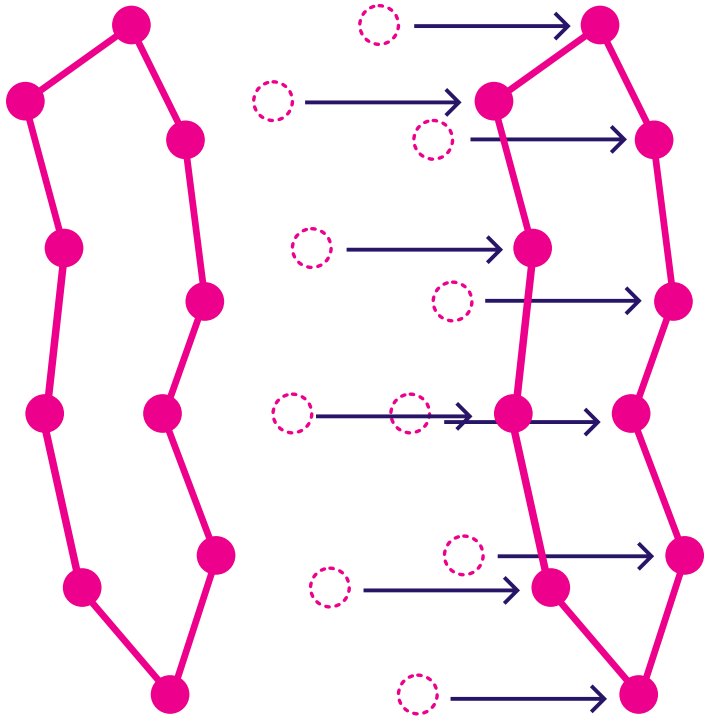
Sustav treba nasumično prelaziti iz Z-sektora u G-sektor i nasumično uzorkovati fazni prostor konfiguracija u svakom sektoru u skladu s vjerojatnostima koje indirektno određuje hamiltonijan sustava.

Prva vrsta pomaka je translacija jednog nasumično odabranog zatvorenog polimera ili više polimera kojima su međusobno spojeni krajevi. Pomak translacije nije karakterističan samo za worm algoritam već općenito za PIMC. Nasumično se uzme neki broj iz intervala $r = [0,1]$ i pomnoži unaprijed određenim rasponom pomaka, Δl. Zatim se nasumično odabere neka prostorna os x, y ili z. Ovisno o dimenzionalnosti prostora može biti samo x ili y ili samo

x ako se radi o jednodimenzionalnom prostoru. Radi jednostavnosti, probni pomak zapišimo kao $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + r\Delta\mathbf{l}$. Pomoću Metropolis algoritma pomak se prihvaća ili odbija. Vjerojatnost prihvaćanja pomaka je jednaka

$$P_{\text{translacija}} = \min\left\{1; \exp\left[\sum_{j=1}^{M} V(\mathbf{R}_j) - V(\mathbf{R}'_j)\right]\right\} \tag{63}$$

i ovisi samo o potencijalnom dijelu akcije jer se međusobna udaljenost susjednih zrnaca ne mijenja. Ako je pomak prihvaćen, koordinate svakog zrna odabranog polimera se mijenjaju, $\mathbf{r}'_{i,j} = \mathbf{r}_{i,j} + r\Delta\mathbf{l}$. Raspon pomaka duž koordinatne osi Δl mijenja se tijekom simulacije tako da udio prihvaćenosti pomaka bude između 40% i 60%. Ilustracija translacije je prikazana na Slici 2.3.



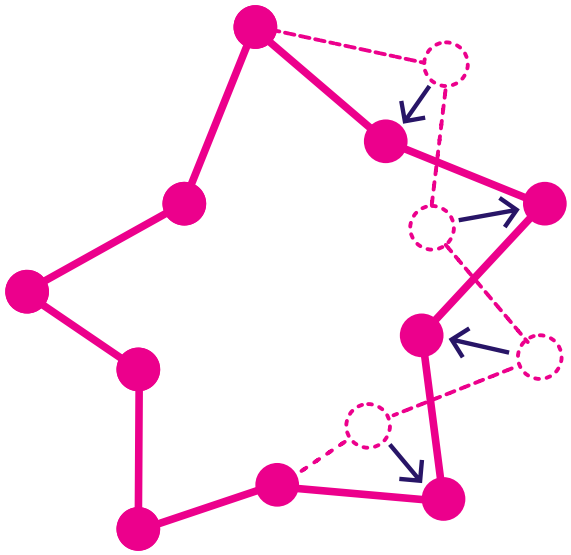
Slika. 2.3: Ilustracija pomaka translacije. Prikazan je sustav od dva polimera u dvije dimenzije. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna. Vjerojatnost prihvaćanja pomaka translacije ovisi samo o potencijalnom dijelu akcije, V^i.

Druga vrsta pomaka u Z-sektoru je lelujanje ili wiggle nasumično odabranog dijela nekog zatvorenog polimera ili više polimera kojima su međusobno spojeni krajevi, tj. koji su spojeni u jedan veći polimer. Kao i translacija, lelujanje nije karakteristično samo za worm algoritam već općenito za PIMC. Nasumično se odabere polimer i dva zrna na način da nasumično

odaberemo jedno zrno, a zatim drugo udaljeno l zrna. Probni pomak svih zrna između zrna $\mathbf{r}_{i,j}$ i $\mathbf{r}_{i,j+l}$ uzorkuje se po raspodjeli određenoj akcijom slobodne čestice [91]. Dakle, probni položaj svakog zrna se uzorkuje po gaussovoj raspodjeli koja je centrirana na starom položaju zrna. Takav algoritam odabira probnih položaja pojednostavljuje uzorkovanje probnih pomaka vezanih harmoničkih oscilatora. Kako se kinetički dio egzaktno uzorkuje, vjerojatnost prihvaćanja pomaka lelujanja ovisi samo o potencijalnom dijelu akcije

$$P_{\text{lelujanje}} = \min\left\{1; \exp\left[\sum_{j=j_0+1}^{j_0+l-1} V(\mathbf{R}_j) - V(\mathbf{R}'_j)\right]\right\}. \tag{64}$$

Parametar l, broj zrna koja će se pomicati se mijenja tijekom simulacije tako da prihvaćenost pomaka bude između 30% i 60% ovisno o ukupnom broju zrnaca i polimera. Ako je broj zrnaca reda veličine 10^3, namještat ćemo l tako da prihvaćenost pomaka lelujanja bude između 20% i 40%. Ako je prihvaćenost pomaka veća od 50% u slučaju velikog broja zrnaca, to znači da je l premali, odnosno da se premali dio polimera leluja. Ako se premali dio polimera leluja, to znači da neefikasno uzorkujemo prostorne konfiguracije i ostatak polimera zapinje na određenim konfiguracijama što uzrokuje pristranu procjenu fizikalnih opservabli. Ilustracija lelujanja je prikazana na Slici 2.4.



Slika. 2.4: Ilustracija pomaka lelujanja. Prikazan je sustav od dva polimera u dvije dimenzije. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna. Vjerojatnost prihvaćanja pomaka lelujanja ovisi samo o potencijalnom dijelu akcije, V^i, jer se pomak egzaktno uzorkuje po raspodjeli određenoj akcijom slobodne čestice.

Translacija i lelujanje pripadaju grupi pomaka kojima se uzorkuje koordinatne konfiguracije. Postoje još pomaci kojima se sustav prebacuje iz Z-sektora u G-sektor i kojima se uzorkuju nedijagonalne konfiguracije. To su pomaci otvaranja, zatvaranja, pomicanje unaprijed i unazad u imaginarnom vremenu i razmjena.

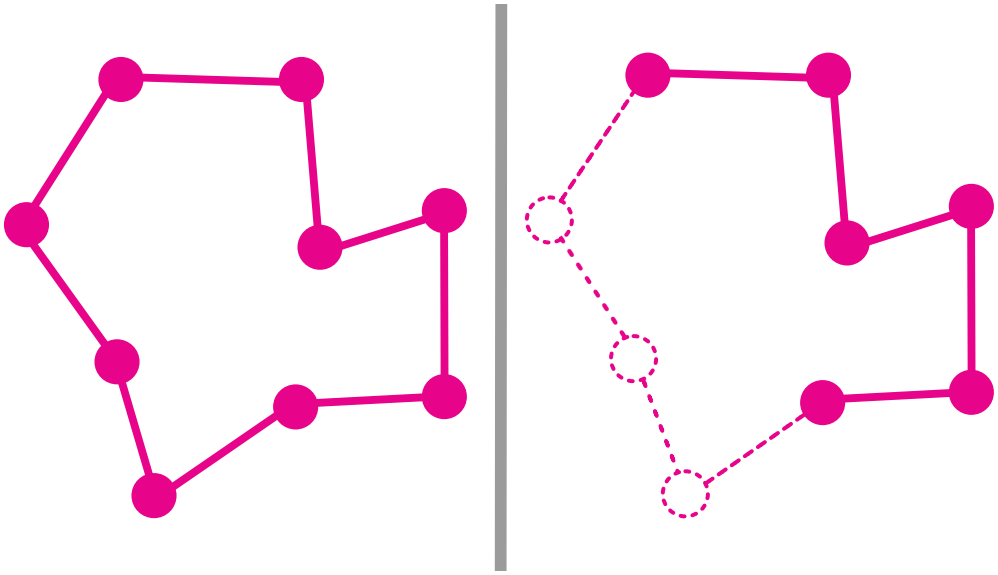
Pomak otvaranja polimera je moguć samo ako je sustav korak prije bio u Z-sektoru, tj. ako su svi polimeri bili zatvoreni, $\mathbf{R}_0 = \mathscr{P}\mathbf{R}_M$. Nasumično odaberemo neki polimer i neko zrno na polimeru, j_0. Zatim nasumično biramo broj iz intervala $l \in [1, \mathrm{IMD}]$. Parametar IMD je slobodni simulacijski parametar koji odredimo na početku proračuna, a jedini uvjet koji mora zadovoljiti je da je manji od ukupnog broja zrnaca u polimeru, $\mathrm{IMD} < M$. Uočili smo da je za većinu proračuna dovoljno postavljati IMD parametar na 10 % od M, odnosno $M/10$. Nakon toga se $l-1$ zrnaca, $\mathbf{r}_{j_0+1}, \mathbf{r}_{j_0+2}, \ldots, \mathbf{r}_{j_0+l-1}$, uklanja s vjerojatnošću

$$P_{\text{otvaranje}} = \min\left\{1; \frac{C \cdot \mathrm{IMD} \cdot N \cdot M \cdot \mathrm{e}^{\Delta V^i}}{\rho_0(\mathbf{r}_{j_0}, \mathbf{r}_{j_0+l}; l\tau)}\right\}, \tag{65}$$

gdje je C slobodni simulacijski parametar, N broj čestica u sustavu, M broj zrnaca po polimeru, a $\rho_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$, [91]

$$\rho_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = (4\pi\lambda\tau)^{-d/2} \exp(-(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2/4\lambda\tau), \tag{66}$$

propagator slobodne čestice i d dimenzija prostora. Ako je pomak prihvaćen, zrnca $\mathbf{r}_{j_0}$ i $\mathbf{r}_{j_0+l}$ postaju vrhovi otvorenog polimera i zovu se Ira i Masha ili glava i rep. Sva zrna između se deaktiviraju i ne uzimaju se u obzir tijekom simulacije sve do trenutka kada se neka od njih ne aktivira pomakom naprijed-nazad ili dok se sve uklonjene ne aktiviraju pomakom zatvaranja. Ako je odabran $l = 1$, tada se samo ukloni kinetički dio akcije između glave i repa. Ilustracija otvaranja polimera je prikazana na Slici 2.5.

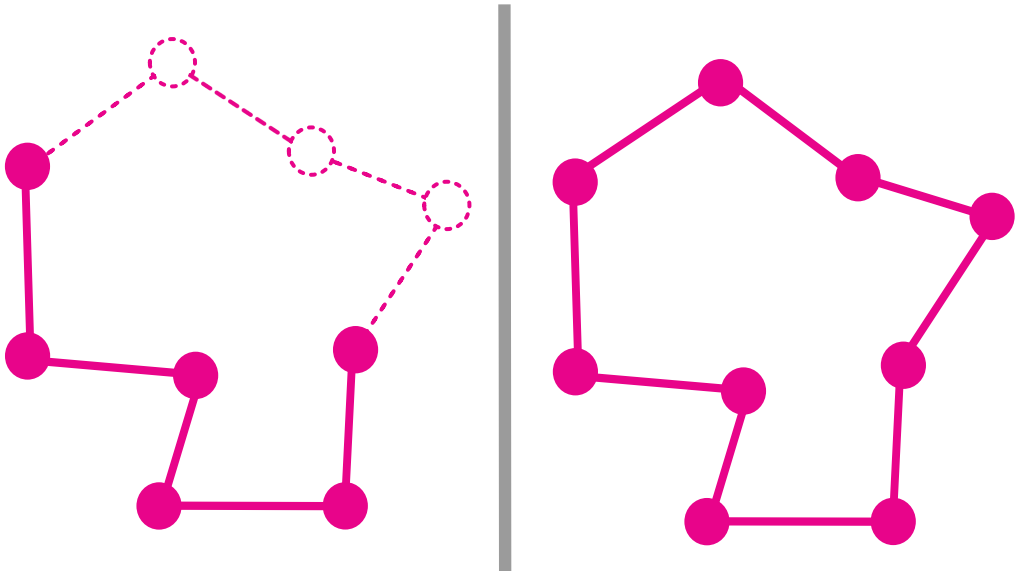


Slika. 2.5: Ilustracija otvaranja polimera. Prikazan je jedan odabrani polimer koji se otvara u dvije dimenzije. Lijevo je zatvoreni polimer, a desno otvoreni polimer nakon uklanjanja nasumično odabranog dijela polimera. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna.

Pomak zatvaranja polimera je moguć samo ako je sustav korak prije bio u G-sektoru, tj. ako je jedan polimer bio otvoren. Probna zrna se uzorkuju po raspodjeli određenoj akcijom slobodne čestice, ali točno onoliko zrnaca koliko ih u danom trenutku nedostaje između glave i repa, $\mathbf{r}_I$ i $\mathbf{r}_M$. Na taj način se štedi na vremenu simulacije. Da se probni položaji zrnaca uzorkuju nasumično, često bi se zatvaranje odbacivalo zbog prevelikog kinetičkog dijela akcije. Kada ih uzorkujemo po raspodjeli koja je već određena akcijom slobodne čestice, uračunali smo kinetički dio i ostaje samo prihvatiti ili ne na temelju potencijalnog dijela akcije. Vjerojatnost prihvaćanja probnog stvaranja zrnaca je dana izrazom

$$P_{\text{zatvaranje}} = \min\left\{1; \frac{\rho_0(\mathbf{r}_I, \mathbf{r}_M; l\tau)\mathrm{e}^{\Delta V^i}}{C \cdot \mathrm{IMD} \cdot N \cdot M}\right\}, \tag{67}$$

gdje je l u ovom slučaju razmak između zrnaca glave i repa, a ΔV^i razlika potencijalnog dijela akcije između stare i probne konfiguracije. Ilustracija zatvaranja polimera je prikazana na Slici 2.6.



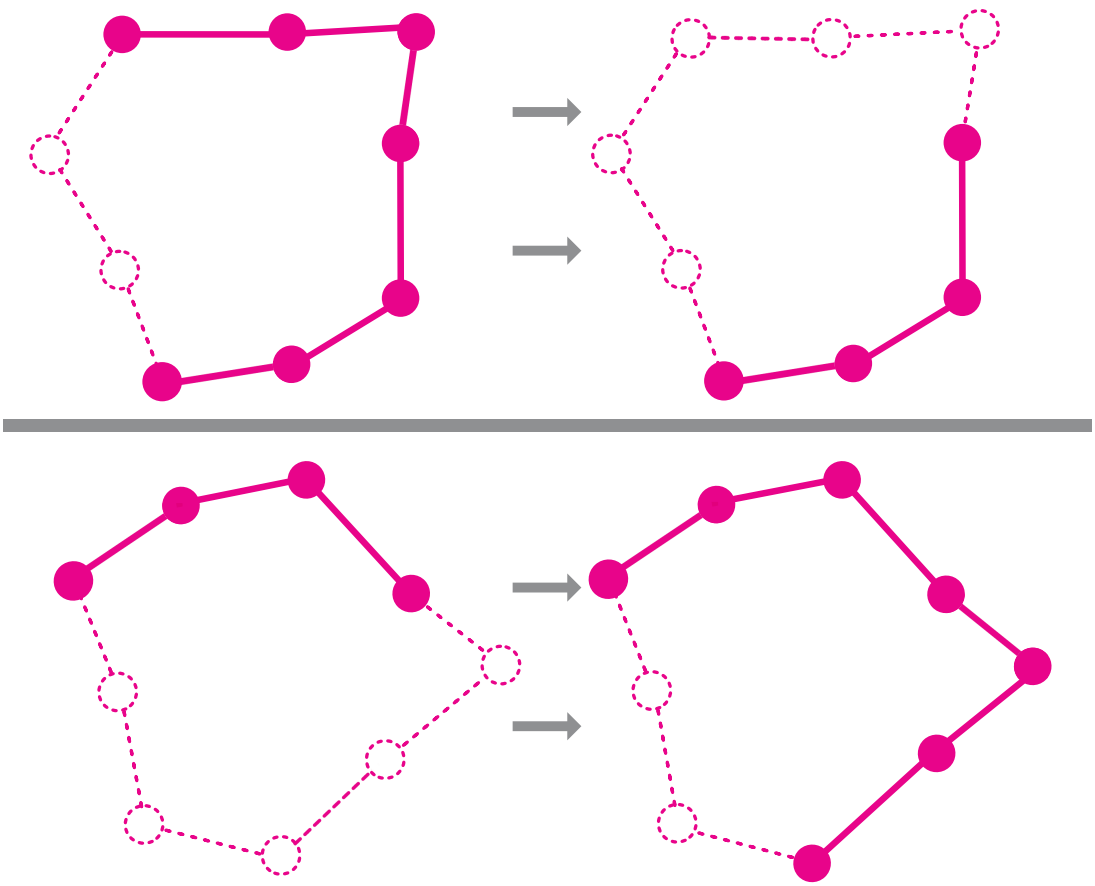
Slika. 2.6: Ilustracija zatvaranja polimera. Prikazan je polimer koji se zatvara u dvije dimenzije. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna.

Slobodni parametar C postavlja se ručno na početku simulacije tako da je udio računalnog vremena kojeg sustav provede u G-sektoru, t_G/t_{ukupno} između 40% i 80%, ovisno o tome što želimo procijeniti. Ako procjenjujemo energiju sustava ili bilo koju drugu dijagonalnu opservablu, dovoljno je provoditi 40% vremena u G-sektoru. Tada se učinkovito uzorkuje prostor, a statistika se brže skuplja za dijagonalne opservable. Ako želimo procijeniti jednočestičnu matricu gustoće, C parametar ćemo namjestiti tako da sustav provodi oko 80% vremena u G-sektoru. Tada se učinkovito uzorkuje prostor, a statistika se brže skuplja za nedijagonalni dio.

Pomak unaprijed ili unazad u imaginarnom vremenu je pomak u kojem se generira dio zrnaca koja nedostaju između glave i repa ili se ukloni dio zrnaca uz uvjet da razmak između glave i repa ne bude veći od zadanog IMD parametrom. Uzorkovanje je analogno uzorkovanju pri zatvaranju polimera, a vjerojatnost prihvaćanja je

$$P_{\text{naprijed}-\text{nazad}} = \min\left\{1; \mathrm{e}^{\Delta V^i}\right\}. \tag{68}$$

Ilustracija pomaka unaprijed, odnosno unazad, je prikazana na Slici 2.7.



Slika. 2.7: Ilustracija pomaka unaprijed (gore) i unazad (dole) u imaginarnom vremenu. Uzorkovanje je analogno uzorkovanju pri zatvaranju polimera. Prikazan je polimer u dvije dimenzije. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna.

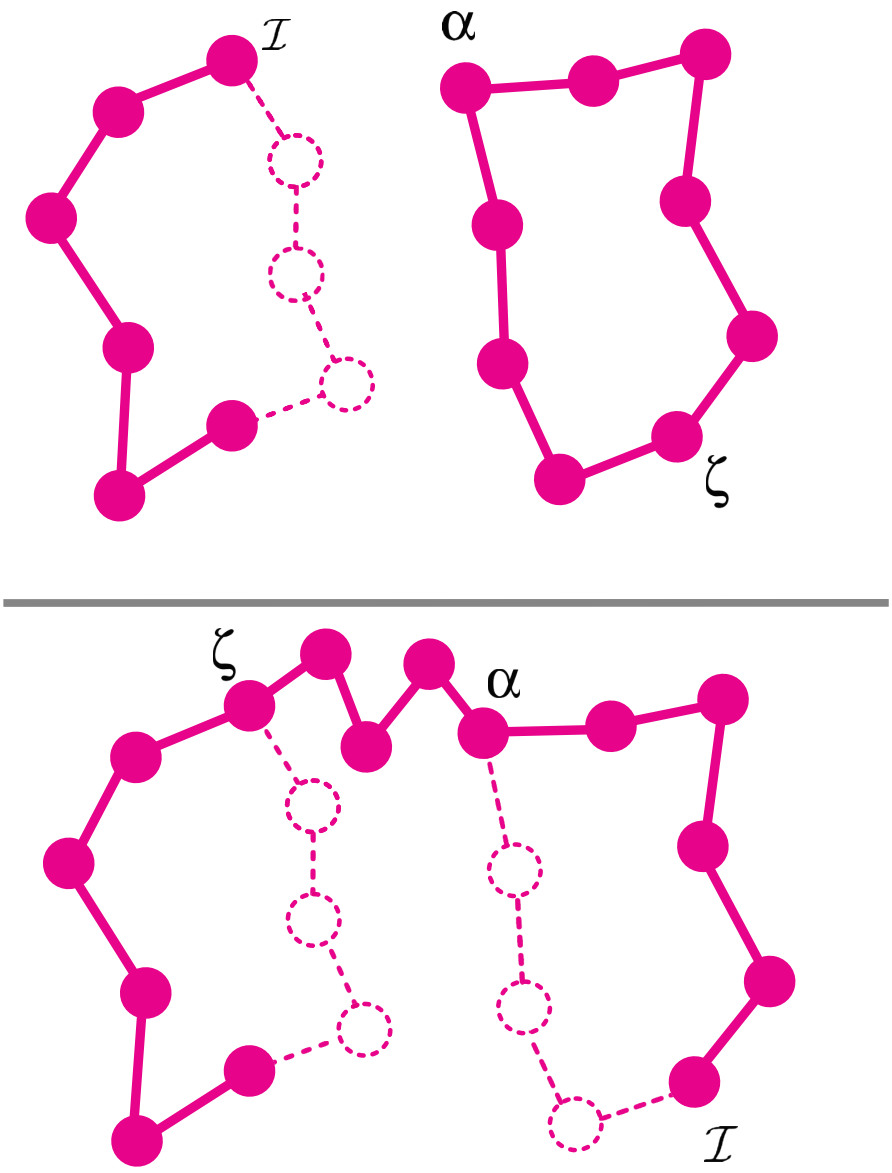
Konačno, pomak razmjene je korak koji je moguć samo u G-sektoru, tj. dok je jedan polimer otvoren. Razmjena uzorkuje permutacije između polimera. Ilustracija pomaka razmjene je prikazana na Slici 2.8. Neka je j_I položaj jednog vrha otvorenog polimera u imaginarnom vremenu. Odaberemo zrno, $\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{r}_{j_I+\mathrm{IMD}}$ koje se nalazi na $j_I + \mathrm{IMD}$ imaginarnom vremenskom koraku, tj. IMD koraka udaljen od vrha $\mathbf{r}_{j_I}$. Zrno $\mathbf{r}_\alpha$ biramo s vjerojatnošću koja je proporcionalna propagatoru slobodne čestice (66) između $\mathbf{r}_I = \mathbf{r}_{j_I}$ i $\mathbf{r}_\alpha$

$$T_\alpha = \frac{\rho_0(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_{j_I}; \mathrm{IMD}\tau)}{\sum_\sigma \rho_0(\mathbf{r}_I, \mathbf{r}_\sigma; \mathrm{IMD}\tau)}, \tag{69}$$

gdje je normalizacija suma po propagatorima svih $\mathbf{r}_\sigma$ koji se nalaze između r_{j_I} i r_α. Izraz (69), zapravo, služi tome da odaberemo zrno r_α koje je najbliže vrhu $\mathbf{r}_{j_I}$. Sada na istom polimeru na kojem je odabran $\mathbf{r}_\alpha$ pronađemo zrno $\mathbf{r}_\zeta = \mathbf{r}_{\alpha-\mathrm{IMD}}$ koje ima istu imaginarnu vremensku koor-

dinatu kao i $\mathbf{r}_I$. Nakon toga konstruiramo probna zrna između $\mathbf{r}_\alpha$ i $\mathbf{r}_I$ po raspodjeli određenoj akcijom slobodne čestice. Pomak se prihvaća s vjerojatnošću

$$P_{\text{razmjena}} = \min\left\{1; \mathrm{e}^{\Delta V^i} \frac{\sum_\sigma \rho_0(\mathbf{r}_I, \mathbf{r}_\sigma; \mathrm{IMD}\tau)}{\sum_\sigma \rho_0(\mathbf{r}_\zeta, \mathbf{r}_\sigma; \mathrm{IMD}\tau)}\right\}. \tag{70}$$



Slika. 2.8: Ilustracija pomaka razmjene. Prikazana su dva polimera u dvije dimenzije. Linije predstavljaju kinetičku akciju, K^i, a kuglice zrna. Iscrtkana zrnca su izbrisana, nemaju nikakav učinak na simulaciju sve dok se ponovno ne aktiviraju pomakom zatvaranja ili pomaka unaprijed u imaginarnom vremenu. Ako se odaberemo zrno na nekom zatvorenom polimeru $\mathbf{r}_\alpha$ nalazi blizu Ire, velika je vjerojatnost da će doći do pomaka razmjene.

Prije prihvaćanja pomaka razmjene treba provjeriti hoće li probni pomak zatvoriti polimer ili stvoriti dodatni otvoreni kraj. U tom se slučaju pomak odbija.

2.4.3 Procjena suprafluidnosti

Udio suprafluida pri konačnim temperaturama pojedine komponente moguće je procijeniti estimatorom površine i estimatorom broja namotaja u sklopu MC integrala po stazama [35]. Udio suprafluida pri apsolutnoj nuli, $T = 0$ K, je procijenjen difuzijom centra mase u sklopu DMC-a. Metode procjene u DMC-u i PIMC-u usko su povezane.

Promotrimo rotirajući sustav opisan Hamiltonijanom

$$H_\omega = H_0 - \omega L_z, \tag{71}$$

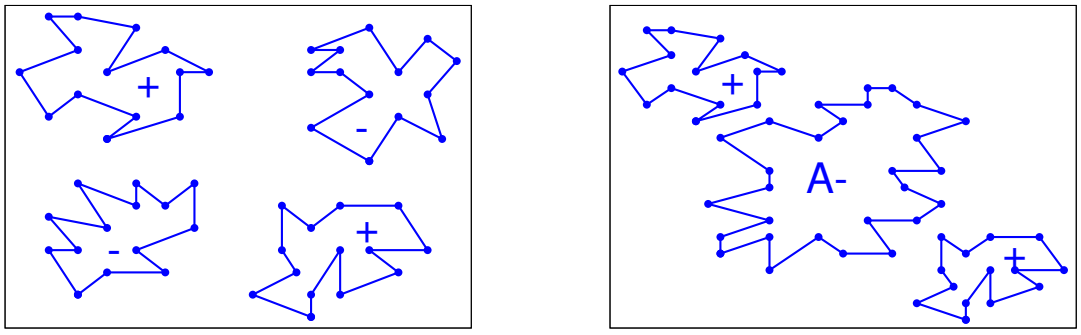
gdje je H_0 Hamiltonijan sustava u mirovanju. Tada se može izvesti estimator površine za procjenu udjela suprafluida unutar PIMC-a [35]

$$\frac{\rho_S}{\rho} = 1 - \frac{I}{I_C} = \frac{2m\langle A_z^2\rangle}{\beta\lambda I_C}, \tag{72}$$

gdje je $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m}$, I_C klasični moment tromosti oko osi rotacije i $\mathbf{A}$ projicirana površina polimera definirana kao

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} \mathbf{r}_{i,j} \times \mathbf{r}_{i,j+1},$$

gdje je $\mathbf{r}_{i,j}$ položaj atoma i na imaginarnom vremenskom koraku j. Komponenta A_z može se interpretirati kao projicirana površina svih polimera na ravninu okomitu na os rotacije. Ilustracija projicirane površine polimera je prikazana na Slici 2.9.



Slika. 2.9: Ilustracija projicirane površine polimera na ravninu okomitu na os rotacije. Lijevo su ilustrirana četiri atoma koji nisu isprepleteni i usrednjena projicirana površina za takve slučajeve je nula. Desno su ilustrirana četiri atoma koji su isprepleteni i imaju ukupnu projiciranu površinu različitu od nule.

Svaki atom možemo zamisliti kao lanac kvazi-klasičnih točki koje imaju zadani raspored. Pri računanju projicirane površine uvijek krećemo od početka do kraja. Neki polimeri će u trenutku računanja biti okrenuti tako da daju pozitivni vektor **A** (površinu), a neki negativni. Ako atomi u danom trenutku nisu isprepleteni međusobno kao što je ilustrirano na lijevoj strani Slike 2.9, usrednjena projicirana površina će biti nula. Ako su isprepleteni, usrednjena projicirana površina će biti različita od nule kao što je ilustrirano na desnoj strani Slike 2.9.

Estimator površine u obliku (72) je koristan za procjenu udjela suprafluida u ograničenim sustavima. Za sustave s periodičnim rubnim uvjetima estimator površine (72) može se svesti na estimator namotaja (*winding number estimator*) [35]

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \frac{\langle \mathbf{W}^2 \rangle}{2\lambda\beta N}, \tag{73}$$

gdje je **W** broj namotaja polimera oko simulacijske ćelije pomnožen s duljinom ćelije u promatranom smjeru. Slijedi jednostavni izvod.

Sustav s periodičnim rubnim uvjetima možemo zamisliti kao torus. Iz izraza (72) znamo da suprafluid postoji ako je projicirana površina polimera različita od nule i to znači da će u slučaju periodičnih rubnih uvjeta biti dovoljno brojati namotaje lanaca oko ćelije jer će svi ostali polimeri davati neznatan doprinos u slučaju dovoljno velike ćelije. **W** se u slučaju periodičnih rubnih uvjeta jednostavno računa kao [92]

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} \mathbf{r}_{i,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}. \tag{74}$$

gdje je N broj atoma, a M broj zrnaca u svakom polimeru.

Sada zamislimo simulacijsku ćeliju kao torus radijusa R. Tada je klasični moment tromosti sustava u simulacijskoj ćeliji jednak

$$I_c = mNR^2 \tag{75}$$

gdje je m masa atoma i N broj atoma u ćeliji. Ako se polimeri namotaju oko ćelije n puta, tada je projicirana površina jednaka umnošku broja namotaja i površine kruga radijusa R

$$\mathbf{A} = R^2 \pi n \hat{n}. \tag{76}$$

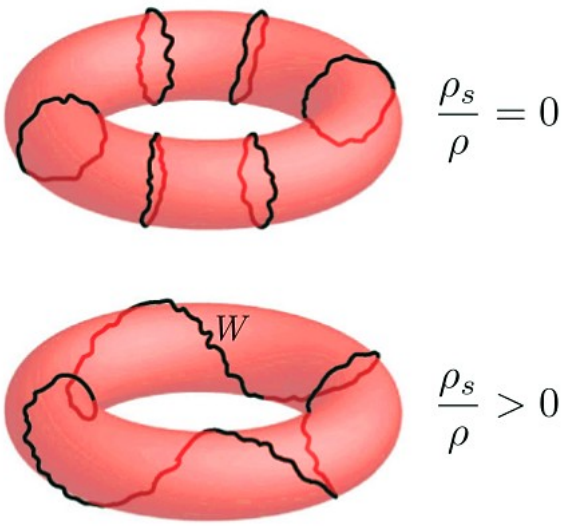
Iz izraza (74) je očito da je

$$\mathbf{W} = 2R\pi n\hat{a} \tag{77}$$

gdje je $\hat{a}$ smijer vektora $\mathbf{W}$. Slijedi da je

$$\mathbf{A} = \frac{(\mathbf{W}\hat{a})R}{2}\hat{n}. \tag{78}$$

Uvrštavanjem izraza za projiciranu površinu (78) i izraza za klasični moment tromosti (75) u slučaju periodičnih rubnih uvjeta u izraz za estimator površine (72) slijedi izraz za estimator namotaja (73). Slučaj s periodičnim rubnim uvjetima i procjena udjela suprafluida pomoću estimatora namotaja je ilustriran na Slici 2.10.



Slika. 2.10: Ilustracija procjene udjela suprafluida pomoću estimatora namotaja. Prikazana jedna simulacijska ćelija s periodičnim rubnim uvjetima. Gore je prikazana situacija kada je udio suprafluida nula, a dolje kada je različit od nule. Ilustracija je preuzeta uz dozvolu iz B. Kulchytskyy, G. Gervais i A. Del Maestro, Phys. Rev. B **88**, 064512 (2013). Copyright (2020) by the American Physical Society.

Udio suprafluida pri apsolutnoj nuli je procijenjen unutar DMC-a pomoću difuzije centra mase. To je metoda koja slijedi iz estimatora broja namotaja [93] i temelji se na procjeni difuzijske konstante centra mase u limesu beskonačnog simulacijskog vremena:

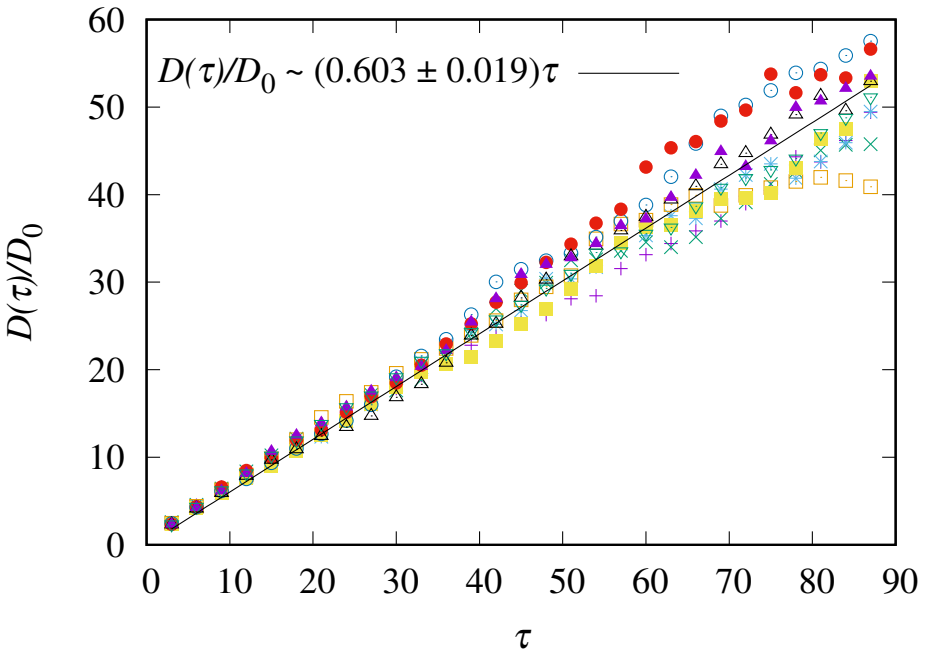
$$\frac{\rho_S}{\rho_0} = \lim_{\tau\to\infty} \frac{D(\tau)}{\tau D_0}, \tag{79}$$

gdje je $D_0 = \hbar^2/2m$ i

$$D(\tau) = \frac{N}{2}\left\langle [x_{\text{c.m.}}(\tau) - x_{\text{c.m.}}(0)]^2 \right\rangle, \tag{80}$$

sa $x_{\text{c.m.}} = \sum_i x_i/N$. Centar mase svih atoma prati se i izvan granica simulacijske ćelije. Odnosno, periodični se rubni uvjeti zanemaruju za varijable koje prate kretanje centra mase.

Primjer procjene udjela suprafluida pri apsolutnoj nuli pomoću difuzije centra mase je prikazan na Grafu 2.1. Primjer se odnosi na jednodimenzionalni sustav helija-4 u periodičnom vanjskom potencijalu. Za jednu duljinu simulacijske ćelije, $L = 50$ Å, za jednu dubinu vanjskog potencijala, $V_0 = 2.37\ E_{\text{R}}$, i za linijsku gustoću $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1} usrednjili smo rezultat deset simulacija koristeći 8 do 10 tisuća šetača. Više o modelu simulacije je napisano u poglavlju 3. Različite točke predstavljaju deset različitih proračuna. Na njih smo fitali pravac koji u ovom primjeru ima nagib $\frac{D(\tau)}{D_0} \sim (0.603 \pm 0.019)\tau$. Stoga se udio suprafluida u ovom primjeru procijenio na $\rho_S/\rho_0 = 0.603 \pm 0.019$.



Graf. 2.1: Primjer procjene udjela suprafluida pri apsolutnoj nuli. Različite točke predstavljaju deset različitih proračuna. Na to smo fitali pravac koji u ovom primjeru ima nagib $\frac{D(\tau)}{D_0} \sim (0.603 \pm 0.019)\tau$.

2.4.4 Procjena udjela Bose-Einsteinovog kondenzata

U PIMC-u je moguće procijeniti egzaktnu matricu gustoće $\rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_M; \beta)$ iz izraza (51). Problem je što bi za to trebalo skupiti dovoljno veliku statistiku pa je praktično teško izvedivo. Ali zato je moguće, i praktično izvedivo, procijeniti reduciranu jednočestičnu matricu gustoće,

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \int d\mathbf{r}_2 \ldots d\mathbf{r}_N \rho(\mathbf{R}_0, \mathbf{R}_M), \tag{81}$$

iz koje je moguće procijeniti udio Bose-Einsteinovog kondenzata, N_0/N. Za interagirajući se sustav može pisati [32, 94]

$$\lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\to\infty} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\langle N_0 \rangle}{N}, \tag{82}$$

gdje je $\langle N_0 \rangle$ očekivani okupacijski broj. Dakle, pomoću PIMC-a možemo lako procijeniti udio Bose-Einstenovog kondenzata iz repa reducirane jednočestične matrice gustoće. No to je samo za slučaj s periodičnim rubnim uvjetima. U slučaju ograničenih sustava, ne možemo procijeniti $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ kada $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to \infty$.

Za sustave u ograničenijima je moguće i praktično je izvedivo procijeniti angularne komponente reducirane jednočestične matrice gustoće kao funkciju iznosa r i r' [95]

$$\rho_l(r_1, r_1') = \int d\Omega_1 d\mathbf{r}_2 \ldots d\mathbf{r}_N \rho(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N; \mathbf{r}_1', \ldots, \mathbf{r}_N) P_l(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1'), \tag{83}$$

gdje su $P_l(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1')$ Legendreovi polinomi. Reducirana jednočestična matrica gustoće, $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, može se rastaviti na angularne komponente [95]

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_l \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1') \rho_l(r, r') \tag{84}$$

i tako PIMC simulacijom indirektno procjenjujemo reduciranu jednočestičnu matricu gustoće iz koje dijagonalizacijom izračunavamo radijalne prirodne orbitale, $\phi_i(r)$, i okupacijske brojeve N_i. Sada ćemo ukratko predstaviti teorijsku pozadinu.

Ako su $\phi_i(\mathbf{r})$ prirodne orbitale i N_i okupacijski brojevi orbitala ili svojstvena stanja, tada je reducirana jednočestična matrica gustoće [95]

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \sum_{ij}\phi_j^*(\mathbf{r}')\phi_i(\mathbf{r})N_i\delta_{ij} \\ &= \sum_{ij}\phi_j^*(\mathbf{r})\phi_i(\mathbf{r}')N_i\delta_{ij}. \end{aligned} \tag{85}$$

Iz (85) slijedi

$$\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\phi_i^*(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')\phi_j(\mathbf{r}') = N_i\delta_{ij}. \tag{86}$$

S indeksom $i=0$ ćemo označavati okupaciju s najvećim udjelom. Kako bismo tehnički mogli dijagonalizirati (85) moramo se ograničiti na radijalni dio. Ako je potencijal sfernosimetričan prirodne orbitale će imat oblik

$$\phi_i(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi), \tag{87}$$

gdje su $Y_{lm}(\theta,\phi)$ sferni harmonici, $R_{nl}(r)$ je radijalni dio valne funkcije, a $i=n,l,m$ su indeksi stanja. Uvrštavanjem (83) i (84) u (85) slijedi

$$\rho_l(r,r') = \sum_n R_{nl}(r)R_{nl}(r')N_{nl}. \tag{88}$$

Kako bismo riješili ovu jednadžbu, koristimo supstituciju [95]

$$u_{nl}(r) = rR_{nl}(r), \tag{89}$$

jer se $u_{nl}(r)$ dobro ponaša za $r\to 0$ što je važno pri numeričkom rješavanju. Tada imamo

$$[r\rho_l(r_1,r_1')r'] = \sum_n u_{nl}(r)u_{nl}^*(r')N_{nl} \tag{90}$$

i

$$\int dr'[r\rho_l(r_1,r_1')r']u_{nl}(r') = u_{nl}(r)N_{nl}. \tag{91}$$

Sada je problem dijagonalizacije sveden na numeričku dijagonalizaciju matrice $[r\rho_l(r_1,r_1')r']$. $u_{nl}(r)$ su svojstveni vektori, odnosno prirodne orbitale, a N_{nl} svojstvene vrijednosti, odnosno okupacijski brojevi. Orbitala kondenzata je ona s najvećom okupacijom

$$\phi_{nl_{\max}}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u_{nl_{\max}}(r)}{r}. \tag{92}$$

2.4.5 Procjena standardne pogreške

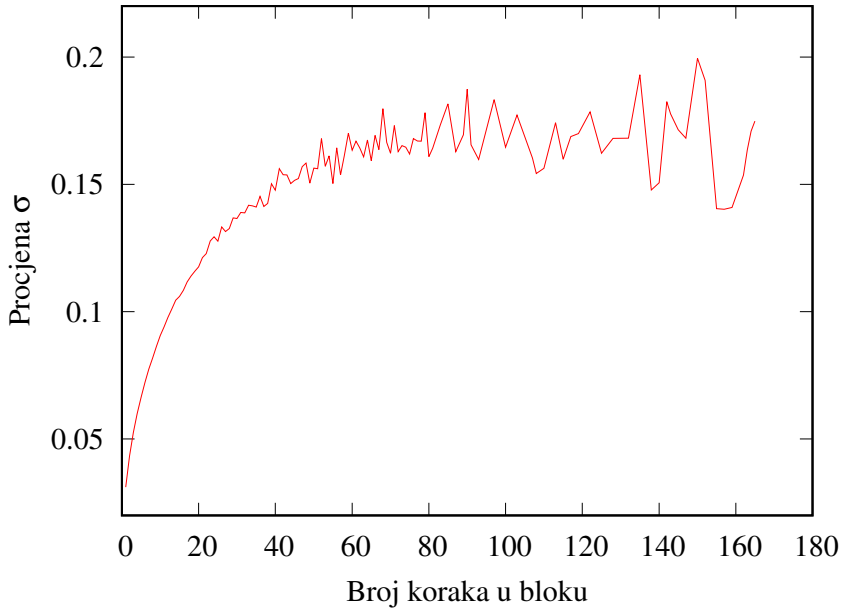
Metropolisovim algoritmom je moguće uzorkovati po proizvoljnim distribucijama vjerojatnosti, samo treba obratiti pozornost na dva problema. Prvi je taj što se procjena srednje vrijednosti koju računamo asimptotski približava rješenju. Zbog toga treba obratiti pozornost na to koliko sustavu treba vremena za ekvilibraciju. Ne postoji univerzalna metoda kojom bi se odredilo vrijeme ekvilibracije nego se za svaki proračun individualno odredi koliko će se početnih koraka odbaciti.

Drugi problem je što korelacija između uzorkovanja uzrokuje pogrešnu procjenu standardne pogreške srednje vrijednosti. Taj se problem zaobilazi metodom blokiranja. Primjer ovisnosti procjene standardne pogreške o broju koraka po bloku je prikazan na Grafu 2.2. Uzorkovane vrijednosti neke opservable O grupiramo u n blokova. Za svaki se blok j usrednji $\langle O_j \rangle$ koji su stohastički neovisni jedni o drugima ako su blokovi dovoljno veliki, tj. ako je broj elemenata po bloku dovoljno velik. Tada standardnu pogrešku računamo izrazom

$$\sigma_O = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_{j=1}^{n} (O_j - \langle O \rangle)^2}, \tag{93}$$

gdje je O_j srednja vrijednost unutar bloka j, $\langle O \rangle$ usrednjena vrijednost svih blokova zajedno, a n broj blokova.

Dodatni potencijalni izvor problema kod svih Monte Carlo metoda koje koriste Metropolis algoritam je prevelika ili premala prihvaćenost pomaka. Ako je prihvaćenost pomaka premala (manja od 20%) to znači da se probni pomaci prečesto nalaze u područjima niske vjerojatnosti i procjena srednjih vrijednosti sporo konvergira. Ako je prihvaćenost prevelika (veća od 80%) probni pomaci su prečesto u područjima visoke vjerojatnosti. To znači da uzorkovanje faznog prostora neće biti efikasno jer će sustav teško dolaziti u područja nižih vjerojatnosti. Općenito je najefikasnije namjestiti slobodne parametre simulacije tako da je prihvaćenost svakog pomaka oko 50%. Tako je konvergencija rezultata dovoljno brza, a uzorkovanje prostora konfiguracija efikasno.



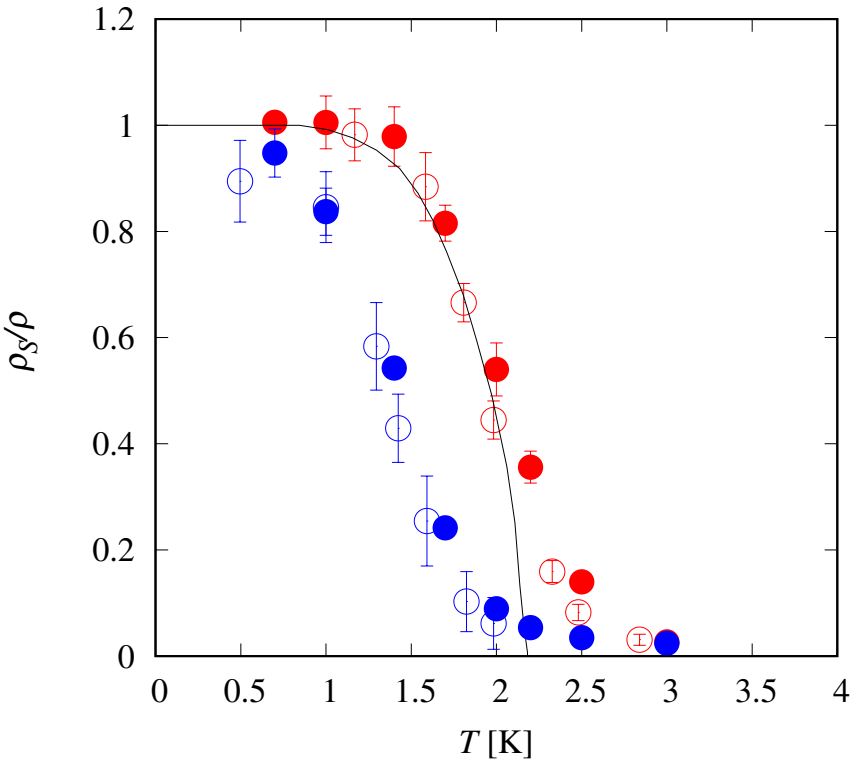
Graf. 2.2: Primjer ovisnosti procjene standardne pogreške, σ, o broju koraka po bloku.

2.4.6 Testiranje procjene udjela suprafluida

Metodu procjene udjela suprafluida pomoću estimatora površine i estimatora namotaja testirali smo na sustavu od 64 atoma ^{4}He i usporedili s eksperimentalnim rezultatom i ostalim PIMC rezultatima objavljenim u relevantnim znanstvenim člancima.

Estimatorom površine smo procijenili ovisnost udjela suprafluida o temperaturi za 64 atoma ^{4}He u kutiji bez periodičnih rubnih uvjeta. Gustoća sustava je $\rho = 0.0218$ Å^{-3}. Estimatorom namotaja polimera oko simulacijske ćelije smo procijenili ovisnost udjela suprafluida o temperaturi za 64 atoma ^{4}He u kutiji s periodičnim rubnim uvjetima. Gustoća sustava je ista u oba slučaja. Za međuatomski interakciju, $V(r_{ij})$, smo koristili Azizov model potencijala iz ref. [96].

Rezultati naših testnih proračuna i usporedba s eksperimentalnim rezultatima i ostalim PIMC rezultatima su prikazani na Grafu 2.3.

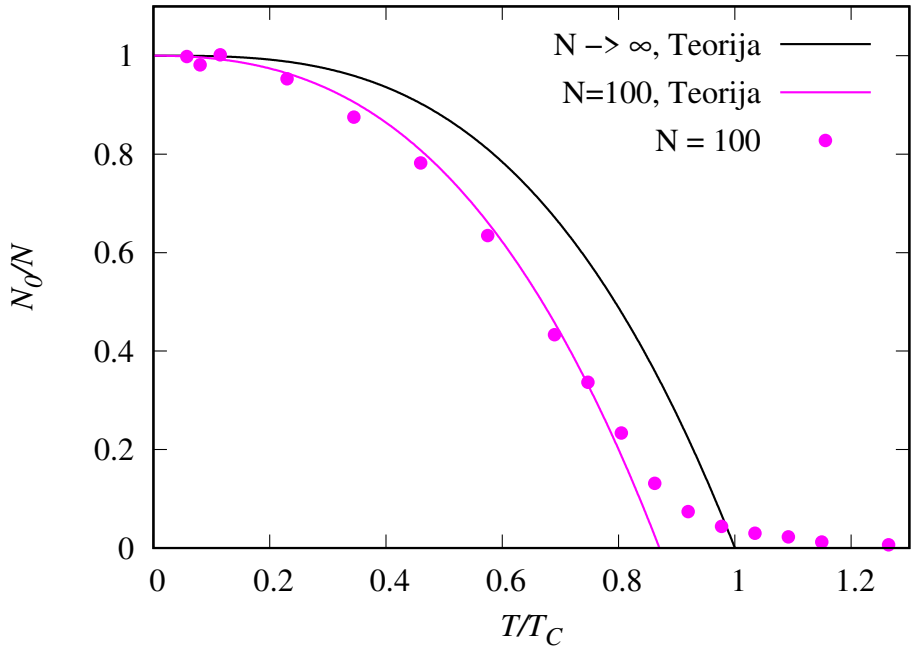


Graf. 2.3: Ovisnost udjela suprafluida ^{4}He. Puna linija predstavlja eksperimentalni rezultat [97]. Crvene točke predstavljaju rezultat PIMC procjene udjela suprafluida pomoću estimatora namotaja za 64 atoma ^{4}He s periodičnim rubnim uvjetima, a plave točke predstavljaju rezultat PIMC procjene udjela suprafluida pomoću estimatora površine za 64 atoma ^{4}He u kutiji bez periodičnih rubnih uvjeta. Prazne crvene točke su preuzete iz ref. [98], a prazne plave iz ref. [99]. Pune točke su naši rezultati.

Očekivano je da se rezultati procjene ovisnosti udjela suprafluida o temperaturi pomoću estimatora površine razlikuju od rezultata procjene pomoću estimatora namotaja jer su u jednom slučaju korišteni periodični rubni uvjeti, a u drugom tvrdi zidovi kutije. Na Grafu 2.3 je očito da su naši rezultati u skladu s PIMC rezultatima iz ref. [98] i [99] koji su pritom dobiveni korištenjem klasične PIMC metode, bez worm algoritma. Rezultati za kutiju s periodičnim rubnim uvjetima su bliži eksperimentalnom rezultatu za praktično beskonačno veliki sustav atoma ^{4}He što je i očekivano. Ovaj test je dovoljan dokaz pouzdanosti naših proračuna u slučaju procjene udjela suprafluida.

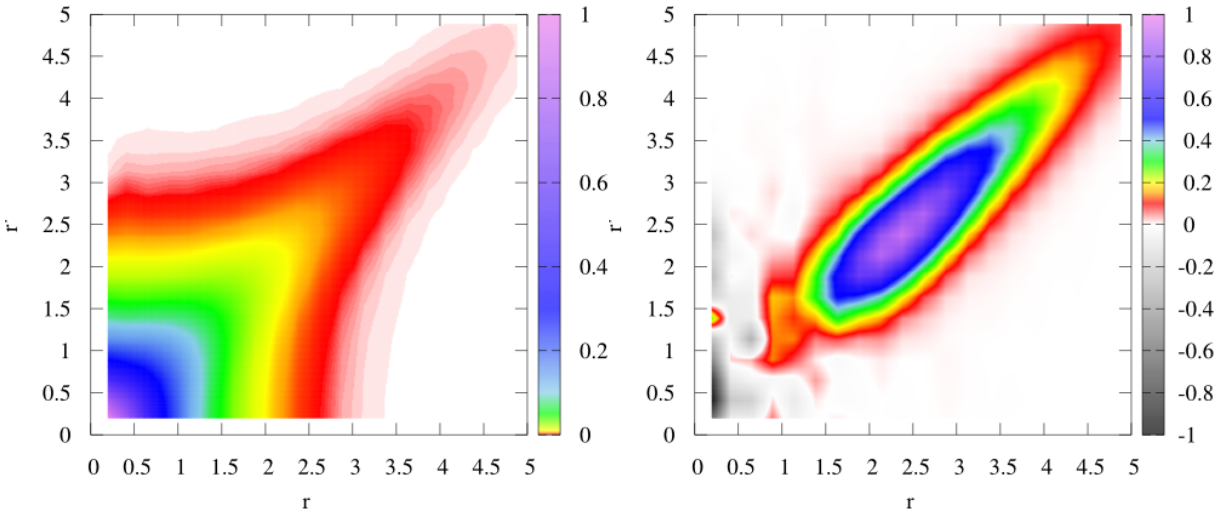
2.4.7 Testiranje procjene udjela Bose-Einsteinovog kondenzata

Metodu procjene udjela Bose-Einsteinovog kondenzata smo testirali na sustavu od 100 neinteragirajućih atoma u harmoničkoj zamci u trodimenzionalnom prostoru. Rezultat procjene udjela suprafluida je prikazan na Grafu 2.4. Pri proračunu smo koristili deset angularnih komponenti u razvoju reducirane jednočestične matrice gustoće. Na grafu je prikazan naš rezultat procjene udjela kondenzata i teorijsko predviđanje ovisnosti udjela kondenzata o temperaturi za $N \to \infty$ [94] i s korekcijom za $N = 100$ [100]. Analitički izvod korekcije za konačni N je izveden u limesu velikog broja atoma što je razlog odstupanja oko temperature prijelaza.

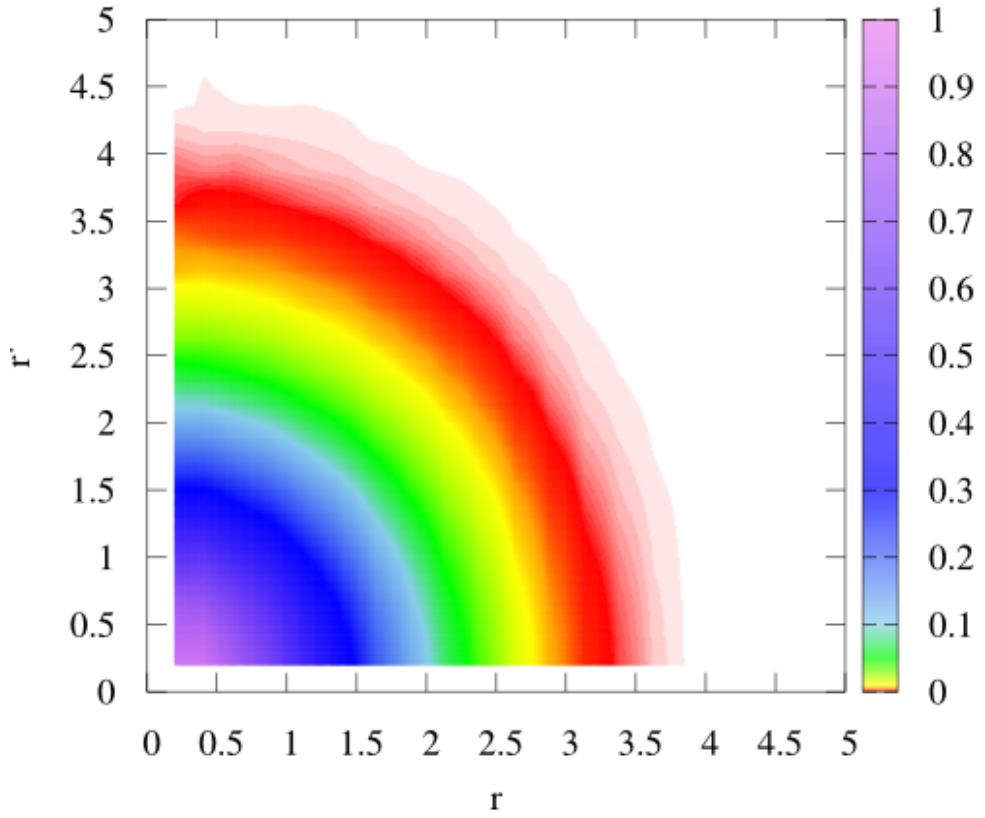


Graf. 2.4: Rezultat ovisnosti udjela Bose-Einsteinovog kondenzata o temperaturi za $N = 100$ atoma u harmoničkoj trodimenzionalnoj zamci procijenjen dijagonalizacijom jednočestične matrice gustoće procjenjene PIMC-om. Rezultat je uspoređen s teorijskim predviđanjem ovisnosti udjela kondenzata o temperaturi za $N \to \infty$ [94] i s korekcijom za $N = 100$ [100]. Analitički izvod korekcije za konačni N je izveden u limesu velikog broja atoma N što je razlog odstupanja oko temperature prijelaza. Rezultat je u skladu s teorijskim predviđanjem ovisnosti za konačni broj atoma [101].

No za konačan broj atoma u zamci, kritična se temperatura prijelaza, T_c, smanjuje u odnosu na $T_c(N \to \infty)$ i ovisnost je glatka oko T_c [101] što je u skladu s našim rezultatom. Primjer rezultata procjene komponenti, $\rho_l(r, r')$, je prikazan na grafovima 2.5 i 2.6.



Graf. 2.5: Primjer procjene komponente $\rho_{l=0}(r,r')$ (lijevo) i $\rho_{l=9}(r,r')$ (desno) za neinteragirajući sustav od sto atoma pri $T = T_c$. Komponente reducirane matrice gustoće nisu normirane, a vrijedi da je omjer tragova $\mathrm{tr}(\rho_{l=0})/\mathrm{tr}(\rho_{l=9}) \approx 40$. r i r' su dani u jedinicama $\sqrt{\hbar/m\omega}$.



Graf. 2.6: Primjer procjene komponente $\rho_{l=0}(r,r')$ za neinteragirajući sustav od sto atoma pri $T = 0.06T_c$. Komponenta nije normirana. Pri niskim temperaturama sav značajan doprinos ukupnoj reduciranoj matrici gustoće daje samo komponente $l = 0$. U ovom slučaju je čak trag komponente $\rho_{l=1}$ dva do tri reda veličine manji od nulte komponente. r i r' su dani u jedinicama $\sqrt{\hbar/m\omega}$.

U ovoj metodi procjene Bose-Einsteinovog kondenzata postoje potencijalni izvori pogreške. Prvi problem može se javiti zbog toga što komponentu matrice, $\rho_l(r,r')$, procjenjujemo na mreži $r,r' \in [\delta r,\ldots,i\delta r,\ldots,R]$, gdje je R gornja granica koju proizvoljno postavimo prije početka proračuna, a $\rho_l(r,r')$ je kontinuirana matrica. Taj problem je izbjegnut tako što smo za testni slučaj provjerili ovisnost konačnog rezultata procjene udjela kondenzata o gustoći mreže na rasponu $r,r' \in [0,\ldots,R]$. Pokazalo se da je dovoljno koristiti mrežu 20×20 jer za sve gušće mreže odstupanje procjene stoji unutar statističke pogreške. Također, što je mreža grublja, to je lakše uzorkovati komponente $\rho_l(r,r')$.

Drugi izvor problema je taj što komponentu matrice gustoće $\rho_l(r,r')$ tretiramo kao konačnu matricu ograničenjem $r,r' \in [0,\ldots,R]$, a matrica $\rho_l(r,r')$ ima konačnu vrijednost za sve r i r'. Taj problem smo izbjegli pažljivim odabirom ograničenja R. Odabrali smo R takav da je matrica $\rho_l(r,r') \approx 0$ zanemariva za sve $r,r' > R$. Procijenili smo udio Bose-Einstenovog kondenzata za različite vrijednosti R i uvjerili se u spomenuto.

Što se tiče procjene standardne pogreške ili standardne devijacije aritmetičke sredine udjela kondenzata, problem je provlačiti standardnu pogrešku elemenata $\rho_l(r,r')$ kroz postupak dijagonalizacije. Unutar PIMC-a se lako procijeni standardna pogreška procjene elemenata $\rho_l(r,r') \pm \sigma_{r,r'}$ pa smo procjenu standardne pogreške udjela kondenzata procijeni drugim načinom. Generirali smo N matrica $\rho_{li}(r,r')$ s nasumičnim elementima iz gaussove raspodjele centrirane na $\rho_l(r,r')$ sa standardnom devijacijom raspodjele $\sigma_{r,r'}$. Nakon toga smo cijeli postupak dijagonalizacije proveli N puta, a konačna procjena udjela kondenzata je jednaka aritmetičkoj sredini N svojstvenih vrijednosti sa standardnom pogreškom procijenjenom iz N uzoraka. Uočili smo da neodređenost elemenata matrice nema znatan utjecaj na neodređenost svojstvenih vrijednosti.

Kako se matrice $\rho_l(r,r')$ procjenjuju numeričkom metodom, $\rho_l(r,r')$ neće biti savršeno simetrična. Trik koji može ublažiti problem je usrednjiti konačnu matricu sa vlastitom transponiranom prije postupka dijagonalizacije

$$\rho_l(r,r') = \frac{\rho_l(r,r') + \rho_l(r',r)}{2}. \tag{94}$$

Za numeričku dijagonalizaciju smo koristili gotove programske pakete unutar Python programskog jezika [102].

3 JAKO INTERAGIRAJUĆI JEDNODIMENZIONALNI SUSTAV BOZONA U PERIODIČNOJ REŠETKI

U ovom poglavlju cilj nam je istražiti prožimanje kvantnih i termalnih fluktuacija koje još nije provedeno korištenjem mnogočestičnog pristupa. To će nam također omogućiti i usporedbu s predviđanjima LL teorije. Prvo ćemo stoga naznačiti osnovne postavke i predviđanja LL teorije, a zatim uvesti model i korištene kvantne Monte Carlo metode.

3.1 Teorija Luttingerove tekućine

Promotrimo sustav od N bozona u jednodimenzionalnom prostoru, srednje linijske gustoće $\rho_0 = N_0/L$, s periodičnim rubnim uvjetima, Haldane [5] je operator polja izrazio preko iznosa i faze $\phi(x)$, $\Psi_B^+ = \rho(x)^{1/2} e^{i\phi(x)}$ te je pokazao da se u granici niskih energija i malih valnih vektora hamiltonijn može pojednostavniti u oblik

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{LL}} &= \frac{\hbar}{2\pi}\int dx[v_J(\nabla\phi)^2 + v_N(\nabla\theta - \pi\rho_0)^2] \\ &= \hbar\left\{\sum_{q\neq 0}\omega_q b_q^\dagger b_q + \left(\frac{\pi}{2L}\right)\left[v_J J^2 + v_N(N-N_0)^2\right]\right\}, \end{aligned} \tag{95}$$

gdje $\frac{\hbar}{2\pi}v_J(\nabla\phi)^2$ predstavlja gustoću kinetičke energije, a $\frac{\hbar}{2\pi}v_N(\nabla\theta - \pi\rho_0)^2 = \frac{\hbar}{2\pi}v_N\Pi(x)^2$ predstavlja gustoću potencijalne energije fluktuacija gustoće. Naime, $\rho(x) = \rho_0 + \Pi(x)$ je gustoća, gdje je $\Pi(x)$ mala i dugovalna promjena u $\rho(x)$, $\nabla\theta \equiv \pi[\rho_0\Pi(x)]$. ω_q su frekvencije modova gustoće. Kako su $q = 2\pi/\lambda$ u dugovalnoj aproksimaciji mali, frekvencija je $\omega_q = v_S q$, gdje je v_S brzina zvuka. Indeks J označava broj faznih namotaja u ϕ kroz duljinu L, $\phi(L) - \phi(0) = 2\pi L$. $(N - N_0)$ je odstupanje broja atoma, N, od srednjeg broja $N_0 = \rho_0 L$. Mi promatramo kanonski ansambl u kojem je broj atoma fiksiran, $N = N_0$.

1D LL invarijantan je na Galilejeve transformacije pa je $v_J = v_J^0 = \pi\hbar\rho_0/m$ i $v_N = (\pi\hbar\rho_0^2\kappa)^{-1}$, gdje je κ jednodimenzionalna kompresibilnost definirana kao $\kappa^{-1} = \rho_0\frac{\partial P}{\partial\rho_0}$. P je definiran kao $P = \rho_0^2\frac{\partial e}{\partial\rho_0}$, gdje je $e = E/N$ ukupna energija po atomu [5, 26, 103]. Na ovaj način su efektivni parametri LL teorije v_J i v_N povezani s mikroskopskim parametrima hamiltonijana.

Unutar LL teorije je definiran Luttingerov parametar, K, kao[9]

$$K = \sqrt{\frac{v_J^0}{v_N}} = \left[\pi^2 \left(\frac{\hbar^2}{m}\right) \rho_0^3 \kappa\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{96}$$

Primijetimo da veliki K znači veliku kompresibilnost. Za $K > 1/2$ predviđa se kvazi-suprafluidni režim, a za $K < 1/2$ kvazi-kristalni režim [6]. Ovisno o parametru K predviđa se da će sustav imati različiti odziv na različite vanjske potencijale. Za velike vrijednosti LL parametra, $K > 2$, sustav je robusan na periodični vanjski potencijal [7], a za $K > 3/2$ robusan na nered, tj. nasumični potencijal [7]. Za $K > 1$ sustav je robusan na jednu nečistoću [8], a za $K < 1$ sustav je osjetljiv na bilo kakav podražaj. Za $K < 3/2$ nasumični potencijal inducira prijelaz iz kvazi-suprafluidnog režima u Mott-izolator fazu [7] dok SF-MI prijelaz inducira sumjerljiva optička rešetka za $K < 2$ [1].

Suprafluidnost u jednoj dimenziji je efekt konačne veličine koja ovisi o umnošku duljine i temperature, $\rho_S(LT)/\rho_0$. To znači da će za beskonačnu duljinu, $L \to \infty$, sustava suprafluidnost iščezavati za bilo koju temperaturu. Iz LL teorije slijedi opis ovisnosti udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, o LT [26, 42, 104]:

$$\frac{\rho_S(LT)}{\rho_0} = \frac{\rho_S^D}{\rho_0}\left(1 - \frac{8\pi a}{LT}\frac{\rho_S^D}{\rho_0}\frac{\sum_{I=1}^{\infty} I^2 \exp\left[-\frac{2\pi a I^2}{LT}\frac{\rho_S^D}{\rho_0}\right]}{1 + 2\sum_{I=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{2\pi a I^2}{LT}\frac{\rho_S^D}{\rho_0}\right]}\right), \tag{97}$$

gdje je $a = \pi\hbar^2\rho_0/k_B m$, a ρ_S^D/ρ_0 slobodni parametar fitanja i vrijedi $\rho_S(0) = \rho_S^D$. Dakle, izraz (97) može se fitati na PIMC rezultate ovisnosti udjela suprafluida o umnošku duljine simulacijske ćelije i temperature. Ako se fitana krivulja vizualno poklapa s PIMC rezultatima i ako se poklapa optimalni parametar fitanja ρ_S^D/ρ_0 s rezultatom DMC-a pri $T = 0$ K, možemo reći da LL teorija vrijedi za dani slučaj. Očekujemo da krivulja (97) neće biti dobar opis rezultata za slučaj kada je sustav u Mott-izolator fazi. Također, očekujemo da u Mott-izolator fazi neće biti skaliranja PIMC rezultata s LT nego da će za svaku duljinu, L, udio suprafluida imati različitu ovisnost o temperaturi.

Iz LL teorije slijedi opis korelacijskih funkcija, funkcije korelacije parova, $g(x)$, i jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, za velike duljine, $x \gg \rho_0^{-1}$, [9]:

$$g(x) = 1 - \frac{2K}{[2\pi\rho_0 d(x|L)]^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_n \cos(2\pi n\rho_0 x)}{[\rho_0 d(x|L)]^{2Kn^2}} \text{ i} \tag{98}$$

$$n(x) = \frac{\rho_0}{[\rho_0 d(x|L)]^{1/2K}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n \cos(2\pi n\rho_0 x)}{[\rho_0 d(x|L)]^{2Kn^2}}, \tag{99}$$

gdje je $d(x|L) = L|\sin(\pi x/L)|/\pi$, zbog periodičnih rubnih uvjeta, a pojednostavljuje se na $d(x|L) \sim x$ za $L \to \infty$. A_n i B_n su slobodni parametri fitanja. Opis funkcije korelacije parova, $g(x)$, i jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, dan u izrazima (98) i (99) vrijedi i pri konačnoj temperaturi, ali samo za $x \lesssim L_T = \hbar v_J/KT$ [9]. Dakle, za $\rho_0^{-1} \ll x \lesssim L_T$, $g(x)$ i $n(x)$ opadaju algebarski. Za $x \gg L_c(T)$, opadanje postaje eksponencijalno [9]:

$$g(x) \approx 1 - \frac{K}{2\pi^2} \left[\frac{\pi/L_T}{\rho_0 \sinh(\pi x/L_T)}\right]^2 + B\cos(2\pi\rho_0 x) \left[\frac{\pi/L_T}{\rho_0 \sinh(\pi x/L_T)}\right]^{2K} \text{ i} \tag{100}$$

$$n(x) \approx A\rho_0 \left[\frac{\pi/L_T}{\rho_0 \sinh(\pi x/L_T)}\right]^{1/2K}. \tag{101}$$

Karakteristična duljina $L_c(T)$ ovisi o korelacijskoj funkciji. Vrijednost svih parametara u LL teoriji moguće je odrediti tek rješavanjem mnogočestične Schrödingerove jednadžbe čemu se u ovom radu pristupilo korištenjem kvantnih Monte Carlo metoda.

3.2 Model i metoda

Proučili smo sustav N atoma helija ^{4}He mase m, koji je opisan Hamiltonijanom

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \Delta_i + \sum_{i<j}^{N} U(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} V_{\text{ext}}(x_i), \tag{102}$$

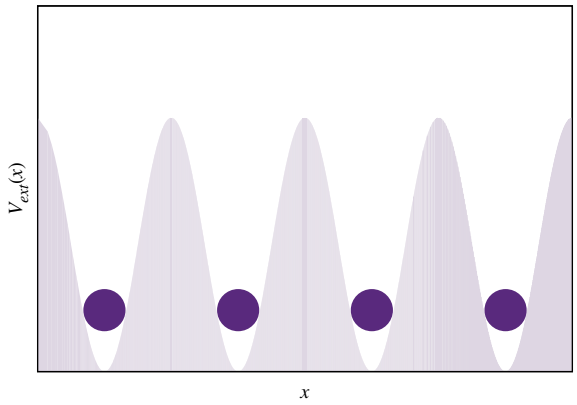
gdje je N broj atoma helija ^{4}He mase m, $r_{ij} = |x_i - x_j|$ udaljenost između dva atoma i i j, $U(r)$ model potencijala interakcije između atoma helija ^{4}He. U prethodnim se istraživanjima [21] helij pokazao kao odličan izbor zbog širokog dosega različitih režima u ovisnosti o linijskoj gustoći. Kao model interakcije smo koristili Azizov potencijal [96]. $V_{\text{ext}}(x)$ predstavlja vanjski potencijal, tj. potencijal optičke rešetke u kojem se nalazi sustav.

Primijetimo da je Hamiltonijan (102) zapisan u čistoj jednoj dimenziji gdje je položaj atoma opisan koordinatom x_i.

U ovom smo istraživnju koristili vanjski potencijal $V_{\text{ext}}(x)$ u obliku

$$V_{\text{ext}}(x) = V_0 \sin^2(kx), \tag{103}$$

gdje je $k = \pi/a_0$, a $a_0 = L/N$ konstanta rešetke takva da sustav u prosjeku ima po jedan atom za svaku jamu ili minimum rešetke. Ilustracija jednog atoma po jami optičke rešetke je prikazana na Slici 3.1.



Slika. 3.1: Ilustracija optičke rešetke i atoma helija ^{4}He. Konstanta rešetke je takva da je jednaka gustoća minimuma i atoma, tj. da svaki atom u prosjeku ima svoju jamu.

Uobičajena jedinica energije u optičkim rešetkama je odskočna energija (*recoil energy*) $E_{\text{R}} = \hbar^2\pi^2/(2ma_0^2)$.

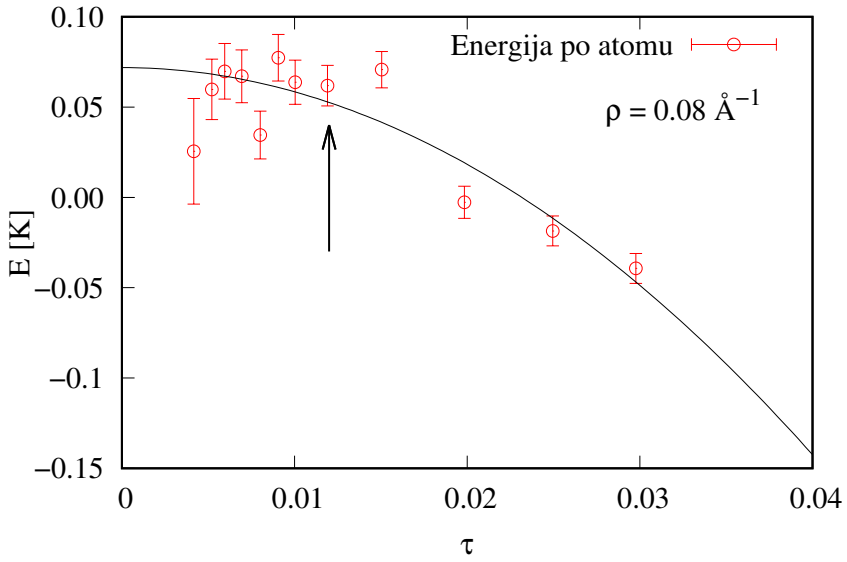
Za proračune pri konačnim temperaturama koristili smo worm algoritam path integral Monte Carlo, a za proračune pri apsolutnoj nuli $T = 0$ K koristili smo difuzijski Monte Carlo. Metode su detaljnije opisane u poglavlju 2.

3.3 Analize metoda

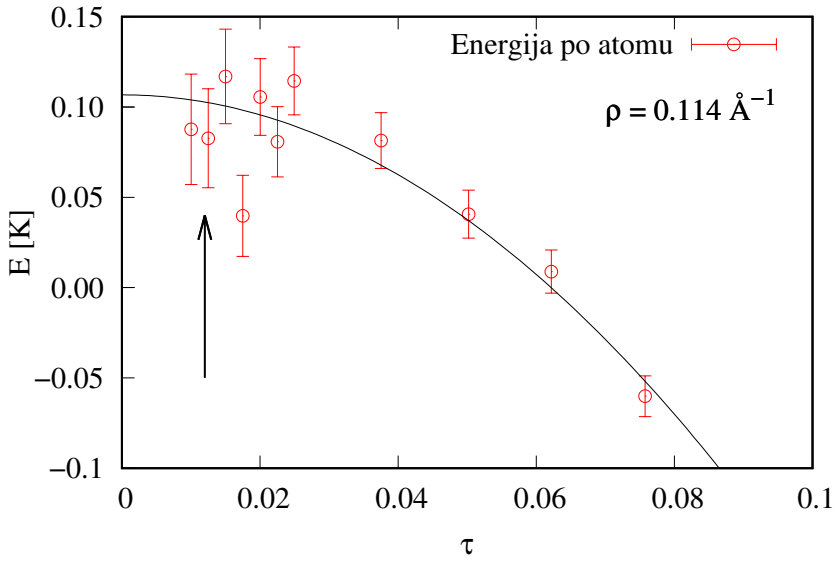
Pri korištenju Monte Carlo metoda važno je provjeriti ovisnost rezultata o slobodnim parametrima kao što je korak u imaginarnom vremenu τ, maksimalni razmak Ire i Mashe te omjer broja uzoraka u G i Z sektoru za PIMC, dok je za DMC važno provjeriti ovisnost rezultata o broju šetača, vremenskom koraku ε i probnoj valnoj funkciji.

3.3.1 Analiza slobodnih parametara PIMC metode

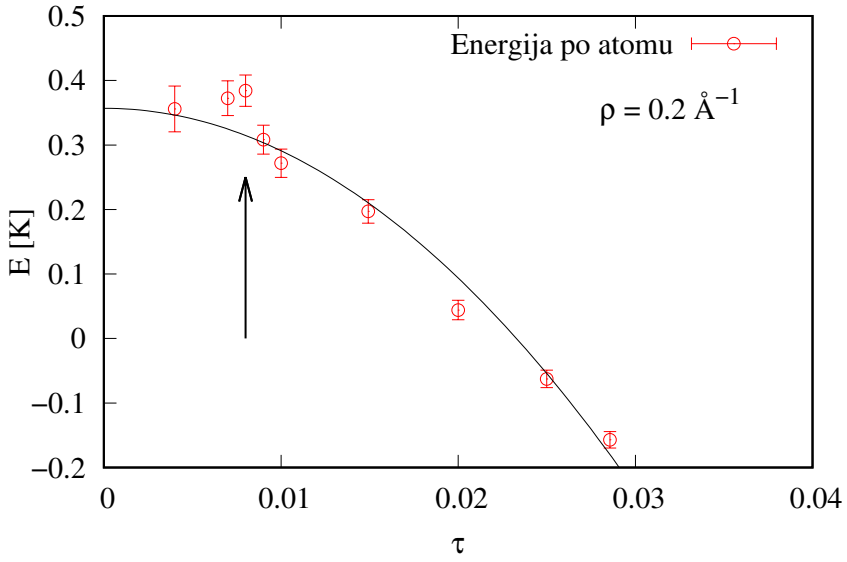
Analizirali smo ovisnost ukupne energije E i udjela suprafluida ρ_S/ρ_0 o koraku u imaginarnom vremenu τ za PIMC proračune. Rezultati analize ovisnosti o τ za tri različite gustoće sustava, $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}, $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} i $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} su prikazani na grafovima 3.1-3.3.



Graf. 3.1: Analiza ovisnosti PIMC rezultata, ukupne energije E o koraku u imaginarnom vremenu τ za gustoću sustava $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}. Strelicom je označena vrijednost za vremenski korak koji je odabran, $\tau = 0.012$ K^{-1}.



Graf. 3.2: Analiza ovisnosti PIMC rezultata, ukupne energije E o koraku u imaginarnom vremenu τ za gustoću sustava $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1}. Strelicom je označena vrijednost za vremenski korak koji je odabran, $\tau = 0.012$ K^{-1}.

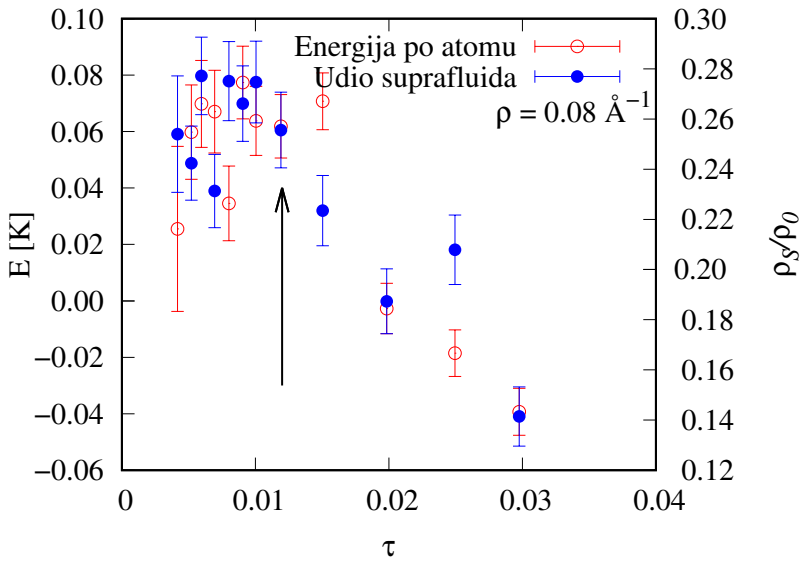


Graf. 3.3: Analiza ovisnosti PIMC rezultata, ukupne energije E o koraku u imaginarnom vremenu τ za gustoću sustava $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}. Strelicom je označena vrijednost za vremenski korak koji je odabran, $\tau = 0.008$ K^{-1}.

U PIMC-u smo koristili $\tau = 0.008$ K^{-1} za gustoću $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}, a $\tau = 0.012$ K^{-1} za ostale gustoće. Ako bismo koristili veći vremenski korak, neke fizikalne veličine bi bile pogrešno procjenjene, dok bi za manji vremenski korak, proračuni bili vremenski zahtijevniji i bio bi

veći šum. Također, u PIMC-u postoji dodatni problem ako se koristi premali vremenski korak. Manji vremenski korak znači više zrnaca u lancu. Kad broj zrnaca prelazi 5000, neefikasno se uzorkuje fazni prostor. Tada ili bi omjer prihvaćenih i odbijenih bio više redova veličine manji ili bi morali smanjiti omjer zrnaca u lancu koja pomičemo u svakom koraku. U prvom slučaju je problem što se znatno računalno vrijeme troši na probne položaje bez rezultata, a estimatori nagomilavaju statistiku iz istog dijela faznog prostora. U drugom slučaju se u svakom koraku premali dio lanca pomiče što opet znači da zapinjemo u faznom prostoru i estimatori nakupljaju lošu statistiku.

Primijetimo da to znači da ne možemo simulirati proizvoljno niske temperature jer je $\tau = \frac{1}{MT}$, gdje je M broj zrnaca u lancu jednog atoma, a T temperatura. Dakle, ako koristimo maksimalno $M = 5000$ zrnaca u lancu atoma, minimalna temperatura koja može se simulirati je $T_{\min} = \frac{1}{5000\tau}$. U nekim situacijama procjena različitih fizikalnih veličina nema istu ovisnost o vremenskom koraku, primjerice kod izračuna udjela suprafluida. Tada se može napraviti dodatna analiza i to ovisnost procjene udjela suprafluida o vremenskom koraku. Može se dogoditi da udio suprafluida dosegne plato puno prije nego energija. U tom se slučaju može koristiti veći vremenski korak za procjenu udjela suprafluida. Najčešće se vremenski korak bira iz ovisnosti ukupne energije, ali kad nas zanima samo udio suprafluida možemo simulirati sustav na toliko nižim temperaturama koliko dozvoli vremenski korak biran iz ovisnosti udjela suprafluida. Time će vremenski korak τ biti malo veći i minimalna temperatura $T_{\min}$ manja, ali će energija sustava biti pogrešno procijenjena. U praksi se to rijetko primjenjuje i to s puno opreza. Na Grafu 3.4 je prikazana usporedba ovisnosti udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, i energije, E, o vremenskom koraku, τ, za gustoću $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}. U našem slučaju je odabran isti vremenski korak za procjenu svih veličina.



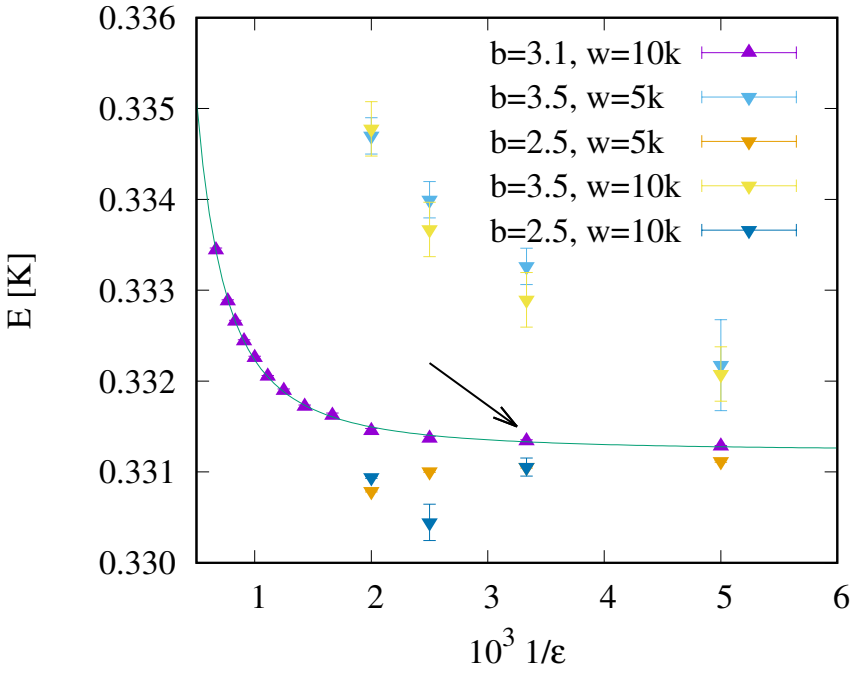
Graf. 3.4: Analiza ovisnosti PIMC rezultata, ukupne energije E i udjela suprafluida ρ_S/ρ_0, o koraku u imaginarnom vremenu τ za gustoću sustava $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}. Strelicom je označena vrijednost za vremenski korak koji je odabran, $\tau = 0.012$ K^{-1}. U ovom slučaju je odabran isti vremenski korak za procjenu svih veličina.

Maksimalna dopuštena udaljenost Ire i Mashe u PIMC-u može biti proizvoljna, a optimalna je 10% od ukupne duljine lanca. Dakle, ako u zatvorenom lancu za jedan atom imamo 500 zrnaca (*bead*), pronašli smo da je optimalno postaviti ograničenje na minimalno 450 zrnaca u G-sektoru, odnosno ograničenje na maksimalnu udaljenost Ire i Mashe na 50 zrnaca. Tako proračuni ne zapinju u G-sektoru i uzorkovanje faznog prostora je efikasno. Procjena fizikalnih veličina se ne razlikuje za ostale vrijednosti parametra maksimalne udaljenosti Ire i Mashe.

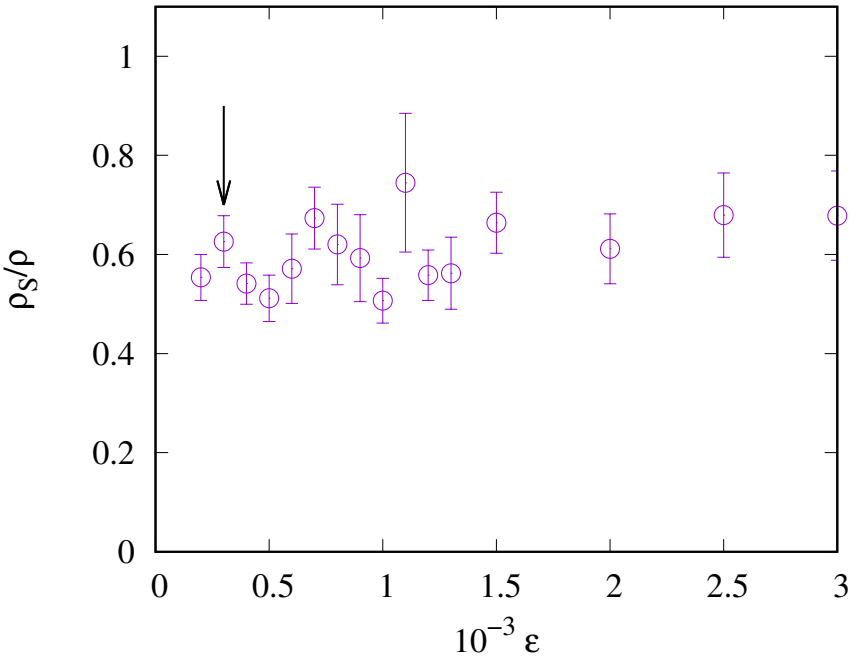
Uz vremenski korak u imaginarnom vremenu, τ, i maksimalnu udaljenost Ire i Mashe u PIMC-u je važno obratiti pozornost i na tzv. C-parametar. C-parametar određuje omjer računalnog vremena koje će sustav provesti u G-sektoru što je očito iz izraza (65) i (67). Ako simuliramo potpuno klasični sustav, u G-sektoru možemo provesti i 0 % vremena. No ako simuliramo bozonske sustave, u G-sektoru moramo provoditi više od barem 10 % računalnog vremena. Ovisno koje fizikalne veličine želimo procijeniti, u G-sektoru je optimalno provoditi između 40 % i 70 %. Ako nas zanimaju nedijagonalne veličine, kao što je jednočestična matrica gustoće, C-parametar ćemo zadati tako da proračuni provode oko 70 % računalnog vremena u G-sektoru. Ako je C-parametar prevelik i u G-sekotru provodimo više od 80 % vremena, proračuni će biti vremenski neefikasni.

3.3.2 Analiza vremenskog koraka DMC metode

Analizirali smo ovisnost ukupne energije E o vremenskom koraku ε, za DMC proračune. Rezultati ovisnosti o ε za gustoću sustava $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i 10000 šetača su prikazani na grafovima 3.5 i 3.6.



Graf. 3.5: Analiza ovisnosti DMC rezultata ukupne energije E o vremenskom koraku ε za gustoću sustava $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}. Strelicom je označen korišteni vremenski korak, $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$ K^{-1}.



Graf. 3.6: Analiza ovisnosti DMC rezultata udjela suprafluida ρ_S/ρ_0 o vremenskom koraku ε za gustoću sustava $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}. Strelicom je označen korišteni vremenski korak, $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$ K^{-1}.

U DMC proračunima smo koristili vremenski korak $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$ K^{-1} za koji je energija dovoljno bliska ekstrapoliranoj vrijednosti. Točke s tim vremenskim korakom su označene strelicama na Grafu 3.5 i Grafu 3.6.

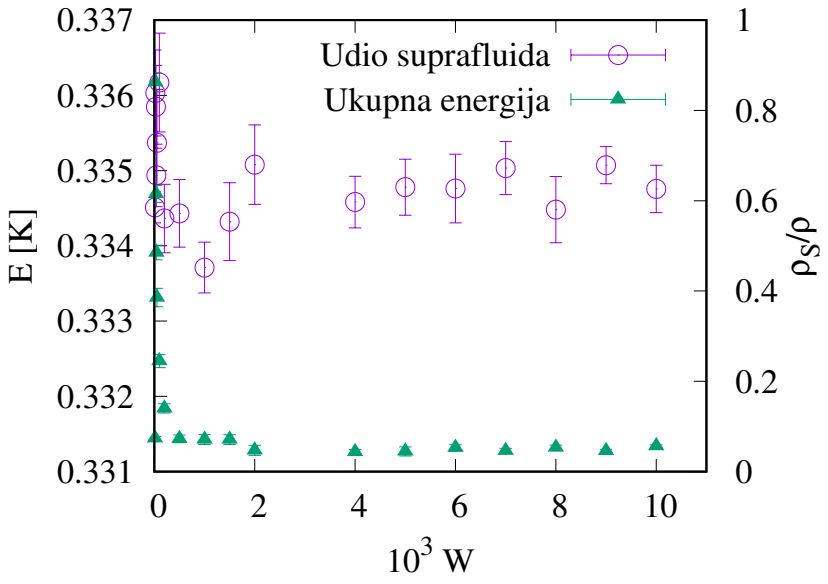
Na Grafu 3.5 su prikazane i ovisnosti energije o vremenskom koraku za različite probne valne funkcije. Za sustav opisan Hamiltonijanom (102) koristili smo Jastrowljevu probnu valnu funkciju koja je dana kao umnožak dvočestičnih korelacija

$$\Psi_0(x) = \prod_{i<j} f(r_{ij}), \tag{104}$$

gdje je $f(r) = \mathrm{e}^{-\left(\frac{b}{r}\right)^5}$, a b proizvoljni parametar. Ovakav oblik probne valne funkcije dobro opisuje kratkodosežne korelacije zbog jako odbojnog dvočestičnog Lennard-Jonesovog potencijala na malim udaljenostima, što se dosada pokazalo kao odlična opcija za DMC probnu valnu funkciju. Parametar b određuje se iz VMC-a. DMC je u mogućnosti popraviti probnu valnu funkciju dokle god ona ima preklapanje s osnovnim stanjem, ali s različitom efikasnosti proračuna. Iz Grafa 3.5 je očito da je optimalno koristiti probnu valnu funkciju oblika (104) s

parametrom $b = 3.1$ Å. Da smo koristili lošiju probnu valnu funkciju, npr. $b = 3.5$ Å, trebali bismo koristiti više šetača, a time i više vremena trošiti na ekvilibraciju. U tom slučaju smo probnu valnu funkciju postavili na nula na području gdje to ne trebala biti što DMC jako sporo ispravlja. U slučaju kada probnu valnu funkciju postavimo s parametrom $b = 2.5$ Å tako da šetači lako ulaze u zabranjeno područje, tj. probna valna funkcija je različita od nule tamo gdje je stvarno osnovno stanje nula, DMC puno lakše ispravlja i konvergira prema zajedničkoj asimptoti. Na Grafu 3.6 je prikazana ovisnost DMC procjene udjela suprafluida ρ_S/ρ_0 o vremenskom koraku ε za gustoću sustava $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}. Uočavamo da je procjena udjela suprafluida unutar standardne devijacije i za znatno veće vremenske korake.

Ovisnost DMC energije i udjela suprafluida o broju šetača je prikazana na Grafu 3.7. U proračunima smo koristili 10 000 šetača. Po analizi se može zaključiti da je dovoljno puno manje šetača nego što je korišteno u ovom radu kako bi se uklonila ovisnost procjene rezultata o broju šetača.



Graf. 3.7: Analiza ovisnosti DMC rezultata udjela suprafluida ρ_S/ρ_0 i energije o broju šetača W za gustoću sustava $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}.

3.4 Rezlutati istraživanja jednodimenzionalnog sustava helija ^{4}He

U ovom su poglavlju predstavljeni rezultati istraživanja jednodimenzionalnih jakointeragirajućih bozonskih sustava. Određena su svojstva u granici temperature $T = 0$ K te na konačnim

temperaturama.

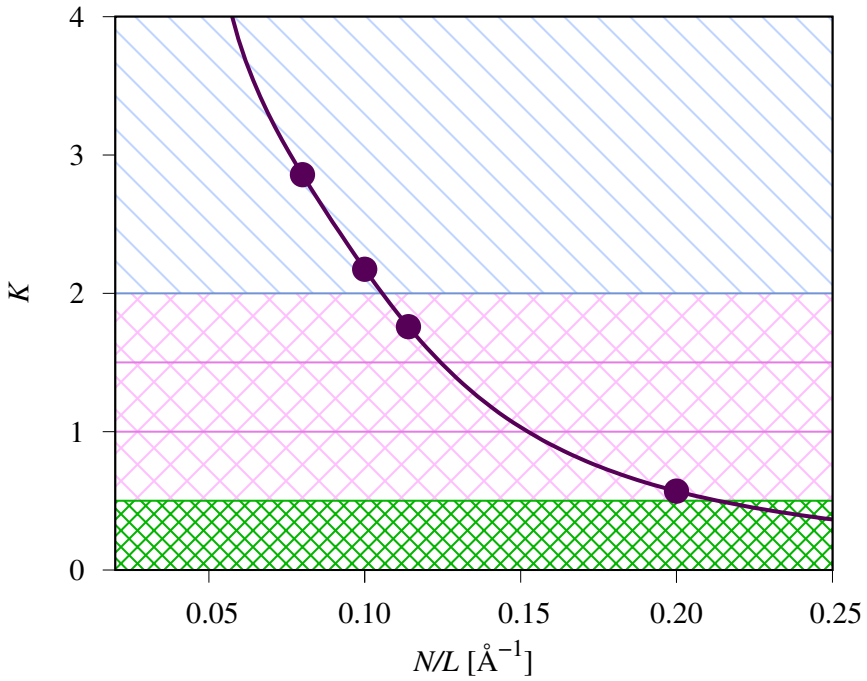
3.4.1 Sustav bez vanjskog potencijala

Prvo smo proračunali svojstva uniformnog sustava. Pri niskim energijama se očekuje da će teorija Luttingerove tekućine [3–5, 42, 105] (*Luttinger liquid, LL*) biti dovoljno dobar opis za ovakvu vrstu sustava. DMC-om smo proračunali jednadžbu stanja, $e = E/N$, za različite gustoće sustava. Iz jednadžbe stanja smo izračunali Luttingerov parametar [9]

$$K = \left(\frac{v_J^0}{v_N}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\pi^2\hbar^2\rho_0^3\kappa}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{105}$$

gdje je ρ_0 linijska gustoća sustava, a κ kompresibilnost.

Rezultati Luttingerova parametra K za uniformni sustav su prikazani na Grafu 3.8 i u skladu su s rezultatima Bertaina *et al.* [21]. Sitne razlike u odabiru međuatomskih interakcija uzrokuju manje razlike u konačnom rezultatu.

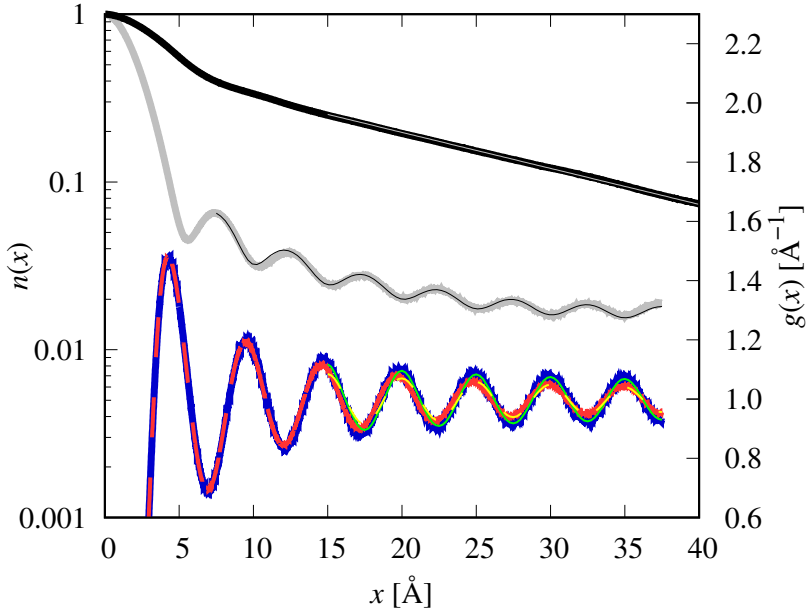


Graf. 3.8: Luttingerov parametar K za uniformni sustav u ovisnosti o linijskoj gustoći procijenjen DMC-om. Četiri točke predstavljaju četiri gustoće koje smo odabrali za proračune u periodičnom potencijalu na konačnim temperaturama, a tri različite zone predstavljaju različite režime predviđene unutar LL teorije: robusni suprafluidni režim, osjetljivi suprafluidni režim i kvazi-krutinu počevši od gore prema dolje.

Za $K < 1$ sustav je osjetljiv na bilo kakav podražaj, a za $K > 2$ sustav je robusan na periodični vanjski potencijal. O robusnosti sustava na vanjski potencijal ovisno o Luttingerovom parametru K je napisano više na početku ovog poglavlja. Različite četiri linijske gustoće sustava koje smo razmatrali su označene točkama na Grafu 3.8.

Rezultati PIMC proračuna funkcije korelacije parova, $g(x)$, i jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, za uniformni sustav su prikazani na Grafu 3.9. Na Grafu su nacrtane linije koje predstavljaju rezultate $n(x)$ za sustav linijske gustoće $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} pri temperaturi $T = 0.19$ K i za sustav linijske gustoće $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} pri temperaturi $T = 0.12$ K. Udaljenost L_T pri kojoj $n(x)$ počinje prelaziti iz algebarske ovisnosti (99) u eksponencijalno opadanje (101) je u prvom slučaju $L_T = 72$ Å, a u drugom $L_T = 14$ Å. U slučaju niže linijske gustoće, $n(x)$ opada eksponencijalno dok se u slučaju veće gustoće sustav efektivno ponaša kao pri apsolutnoj nuli, odnosno opažamo algebarsku ovisnost korelacijske funkcije. PIMC rezultati proračuna $g(x)$

prikazani su za sustav linijske gustoće $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} pri temperaturi $T = 0.04$ K i $T = 0.48$ K. L_T za nižu temperaturu iznosi 340 Å, a za višu 28 Å. Na Grafu 3.9 su prikazani i rezultati fitova pa zaključujemo da su svi rezultati za uniformni sustav, kao što je i očekivano u skladu s predviđanjima LL teorije.



Graf. 3.9: PIMC Rezultati jednočestične matrice gustoće $n(x)$ i funkcije korelacije parova $g(x)$ za uniformni sustav. Gornje dvije debele linije predstavljaju rezultate jednočestične matrice gustoće $n(x)$ za dvije gustoće $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} pri $T = 0.12$ K (gornja) i $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} pri $T = 0.19$ K (donja). Donje dvije debele linije predstavljaju rezultate za funkcije korelacije parova $g(x)$ za dvije temperature pri gustoći $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}. Isprekidana linija je za $T = 0.48$ K, a puna za $T = 0.04$ K. Tanke linije predstavljaju fitove jednadžbi (98) - (101).

3.4.2 Sustav ^{4}He u periodičnom vanjskom potencijalu

Odziv sustava na vanjski periodični potencijal smo proračunali pri četiri različite linijske gustoće označene na Grafu 3.8; $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}, $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}, $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} i $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}. Za dvije manje gustoće, očekujemo da će suprafluidnost sustava biti robusna, a za dvije veće očekujemo da će se suprafluidnost narušiti već pri plitkom potencijalu. Na Grafu 3.10 su prikazani rezultati procjene udjela suprafluida DMC proračunima u ovisnosti o dubini, V_0, vanjskog potencijala (103) u jedinicama odskočne energije, E_R, za tri različite duljine simulacijske ćelije. Po LL teoriji je očekivano da će suprafluidnost biti ista za sve duljine, L, pri apsolutnoj nuli, $T = 0$ K. To je očito slučaj s naše četiri gustoće. Za sve duljine simulacijke ćelije, pri $T = 0$

K, DMC rezultati se poklapaju unutar standardne pogreške. U slučaju dvije manje linijske gustoće (Grafovi 3.10(a) i (b)) za koje je Luttingerov parametar, K, veći od 2, suprafluidnost se poklapa za različite duljine, L, sve do neke kritične dubine vanjskog potencijala što signalizira prijelaz is suprafluidnog režima u Mott izolator. Udio suprafluida očekivano pada sve do kritične dubine. Iz rezultata možemo očitati da je iznos kritične dubine, V_0, za manju gustoću između 1.7 i 2 E_{R}, a za veću gustoću $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} između 0.6 i 0.8 E_{R}. Očito je da je za sustav manje gustoće, odnosno većeg K, potrebna veća dubina potencijala da bi sustav prešao u Mott izolator. Leggett [106] je pokazao da je u slučaju narušavanja translacijske invarijantnosti udio suprafluida, ρ_S/ρ_0, manji od 1 čak i pri apsolutnoj nuli. Ovaj efekt nije vidljiv u našim rezultatima zbog još uvijek prevelike statističke pogreške. Kako bismo mogli vidjeti taj efekt, potrebni su puno duži proračuni. Moguće je da bi bilo potrebno čak 10-100 puta više računalnog vremena, dakle, barem jedna godina računanja pomoću računalnih klastera koje smo koristili.

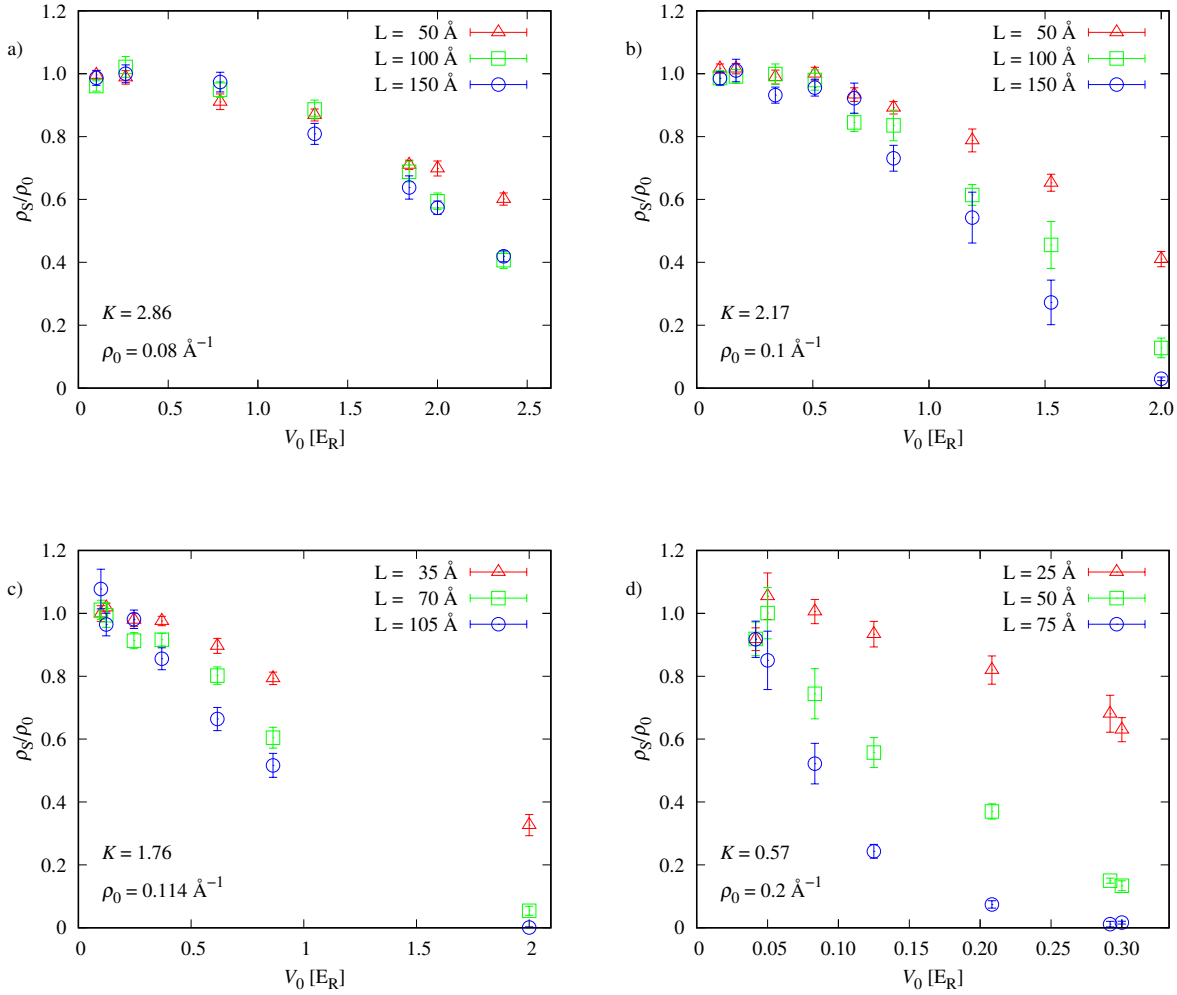
Zanimljivo je usporediti naše rezultate za slučajeve s Luttingerovim parametrom većim od 2 s eksperimentalnim rezultatima [10, 16] u kojima je kritična dubina potencijala izražena preko Lieb-Liniger parametra γ [107]. U odsustvu optičke rešetke ($V_0 = 0$), Luttingerov parametar, K, se može povezati s Lieb-Linigerovim parametrom, γ, za sve jačine interakcija [16]

$$K \approx \begin{cases} \frac{\pi}{\sqrt{\gamma - \gamma^{3/2}/(2\pi)}}; & \gamma \leq 10, \\ (1+2/\gamma)^2; & \gamma \gg 10. \end{cases} \tag{106}$$

To je parametar kojim se opisuje jačina interakcije u homogenim jednodimenzionalnim sustavima. U našim Monte-Carlo rezultatima i eksperimentalnim iz radova [10, 16] se razlikuju detalji interakcija između atoma, ali možemo usporediti slučajeve s istim Luttingerovim parametrom K. Za naš slučaj s linijskom gustoćom $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}, Luttingerov parametar iznosi oko $K = 2.86$. Ista vrijednost parametra K u ref. [16] dobiva se za iznos Lieb-Liniger parametra $\gamma = 1.5$. Iz rezultata različitih mjerenja može se procijeniti da je kritična dubina potencijala između 1.5 i 2.9 E_{R} dok je za istu vrijednost parametra γ u ref. [10] kritična dubina između 2.4 i 3 E_{R}. Za linijsku gustoću $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}, Luttingerov parametar iznosi oko $K = 2.17$, a odgovarajući $\gamma = 2.86$. Za taj γ u ref. [16] $(V_0)_C$ iznosi oko 0.5 E_{R}, dok je u ref. [10] između 1.2 i 1.4 E_{R}.

Za slučajeve s većim linijskim gustoćama, odnosno Luttingerovim parametrom manjim

od 2, potrebne su duže simulacije kako bismo mogli provjeriti što se točno događa s udjelom suprafluida pri plitkim rešetkama. Naši rezultati zbog statističke pogreške ne daju odgovor na pitanje nestaje li suprafluidnost već pri jako plitkim rešetkama ili ipak postoji konačna kritična dubina. No očito je da suprafluidnost nestaje za $V_0 > 0.1\ E_\mathrm{R}$ za slučaj kada je linijska gustoća $\rho_0 = 0.114\ \text{Å}^{-1}$ i za $V_0 > 0.04\ E_\mathrm{R}$ za slučaj kada je linijska gustoća $\rho_0 = 0.2\ \text{Å}^{-1}$ što je očekivano i iz teorije i iz eksperimenata.



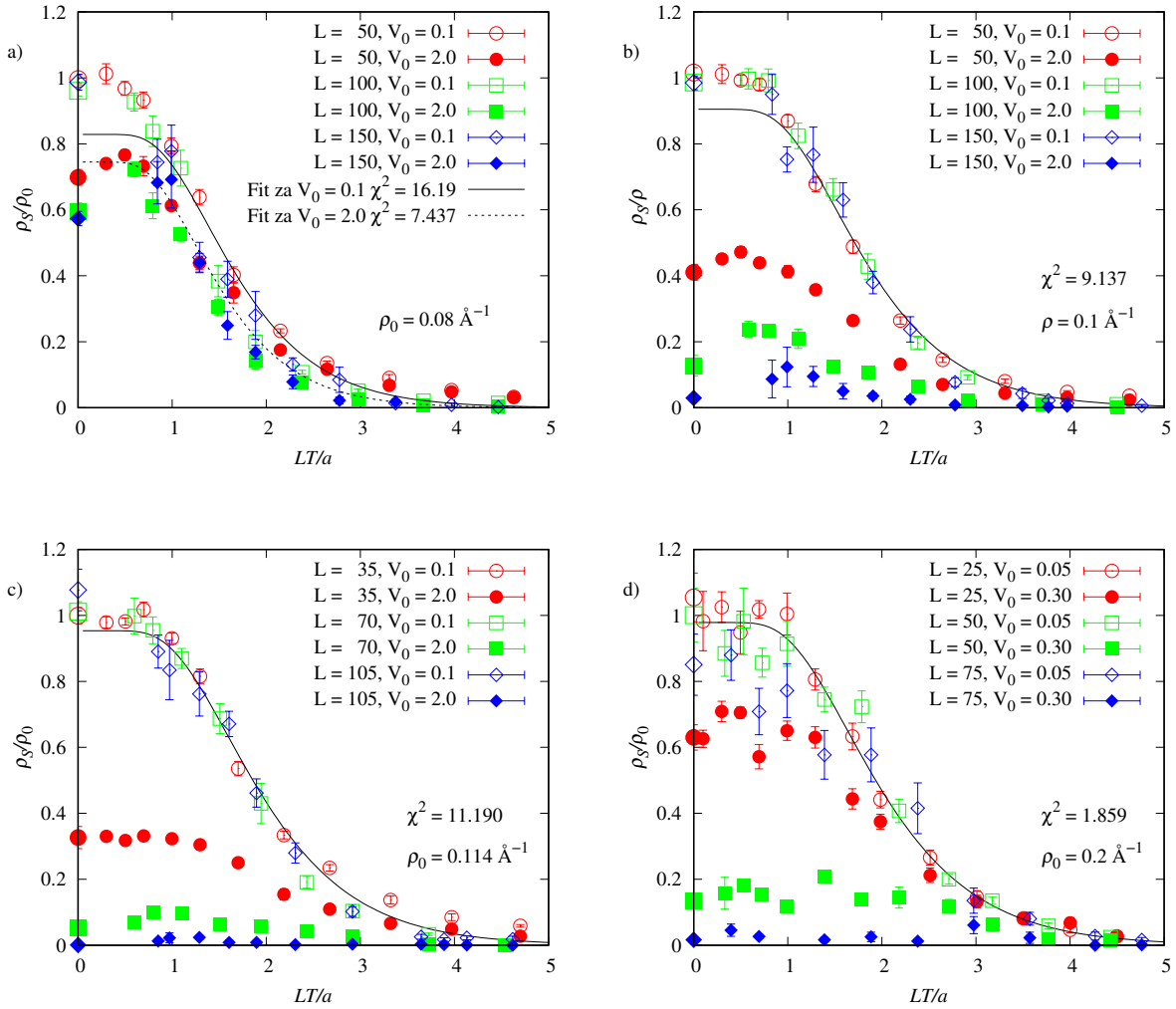
Graf. 3.10: DMC rezultati procjene udjela suprafluida u ovisnosti o dubini potencijala V_0 pri apsolutnoj nuli $T = 0$ K za četiri različite linijske gustoće: (a) $\rho_0 = 0.08\ \text{Å}^{-1}$, (b) $\rho_0 = 0.1\ \text{Å}^{-1}$, (c) $\rho_0 = 0.114\ \text{Å}^{-1}$ i (d) $\rho_0 = 0.2\ \text{Å}^{-1}$.

Kao što je prethodno spomenuto, po LL teoriji, udio suprafluida jednodimenzionalnog sustava bi trebao skalirati s umnoškom duljine i temperature, LT, ako je u suprafluidnom režimu. Također, očekujemo da se ovisnost udjela suprafluida o LT može opisati izrazom (97) ako je

sustav u suprafluidnom režimu, ali samo za uniformni sustav bez vanjskog potencijala. Na Grafu 3.11 su prikazani PIMC rezultati za različite duljine, temperature, dvije dubine vanjskog potencijala i četiri linijske gustoće koje su označene na Grafu 3.8. Za $T = 0$ K ($LT = 0$) su dodani DMC rezultati radi jasnije usporedbe rezultata dviju metoda. Za slučaj dvije najniže linijske gustoće, $\rho = 0.08$ Å^{-1} i $\rho = 0.1$ Å^{-1} (grafovi 3.11a i 3.11b), sustav je očekivano u suprafluidnom režimu za dubinu $V_0 = 0.1\ E_\mathrm{R}$, a za $V_0 = 2\ E_\mathrm{R}$ očekivan je Mott-izolator. DMC i PIMC rezultati se, općenito, slažu. Pri plitkoj optičkoj rešetki, $V_0 = 0.1\ E_\mathrm{R}$, PIMC rezultati za različite duljine se poklapaju, tj. rezultati prate istu liniju, dok se za dublju rešetku razdvajaju rezultati za različite duljine. Suprafluidnost ne skalira sa LT kada je sustav u Mott izolator režimu. Povećanjem L dolazimo do režima u kojem suprafluidnost za neki konačni L iščezava za sve temperature. U našem slučaju taj efekt vidimo pri gustoćama $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} i $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} za duljine $L = 105$ Å i $L = 75$ Å redom. Što se tiče izraza za opis udjela suprafluida u ovisnosti o LT koji slijedi iz LL teorije (97), fitana krivulja procjenjuje nižu vrijednost suprafluida pri apsolutnoj nuli. To je najočitije u primjeru s dvije najniže linijske gustoće. Zaključak je da teorijski model (97), koji ne uključuje vanjski potencijal, nije odgovarajuć za opis skaliranog suprafluida pri niskim LT.

Za slučaj linijske gustoće $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} (Graf 3.11c), pri plitkoj rešetki dubine $V_0 = 0.1\ E_\mathrm{R}$ izgleda da je sustav suprafluidan. U stanju izolatora, pri dubini rešetke od $V_0 = 2\ E_\mathrm{R}$, ovisnost suprafluidnosti o LT se razdvaja za različite duljine i za konačnu duljinu, L, iščezava za svaku temperaturu. PIMC i DMC rezultati se poklapaju. Slično ponašanje je uočeno i za slučaj najveće linijske gustoće, $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} (Graf 3.11d). Razlika je jedino što u zadnjem slučaju suprafluidnost iščezava pri znatno plićim rešetkama. Čak i pri dubini $V_0 = 0.05\ E_\mathrm{R}$ nije savršeno jasno je li sustav suprafluidan ili ne. Pogreške procjene su velike i nije jasno postoji li konačna duljina L za koju suprafluidnost iščezava za sve temperature. Simulacije su zahtijevnije pri gustoći $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} i zasada ostaje nepoznanica postoji li, ipak, konačna kritična dubina potencijala pri kojoj sustav prelazi u izolator ili već uz prisutnost infinitezimalno plitke rešetke suprafluidnost iščezne.

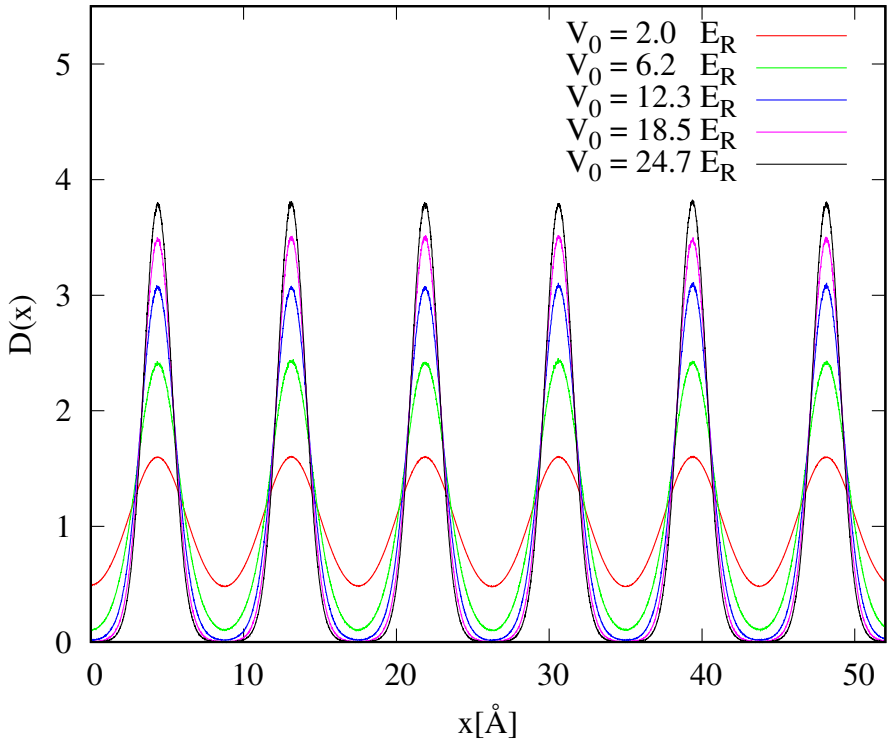
Zanimljiv efekt je uočen za slučajeve s dubljim rešetkama. Kako se LT smanjuje suprafluidnost raste do neke vrijednosti pa zatim pada kako LT teži u nulu. Efekt je izražen u dva slučaja niže gustoće, $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1} i $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}.



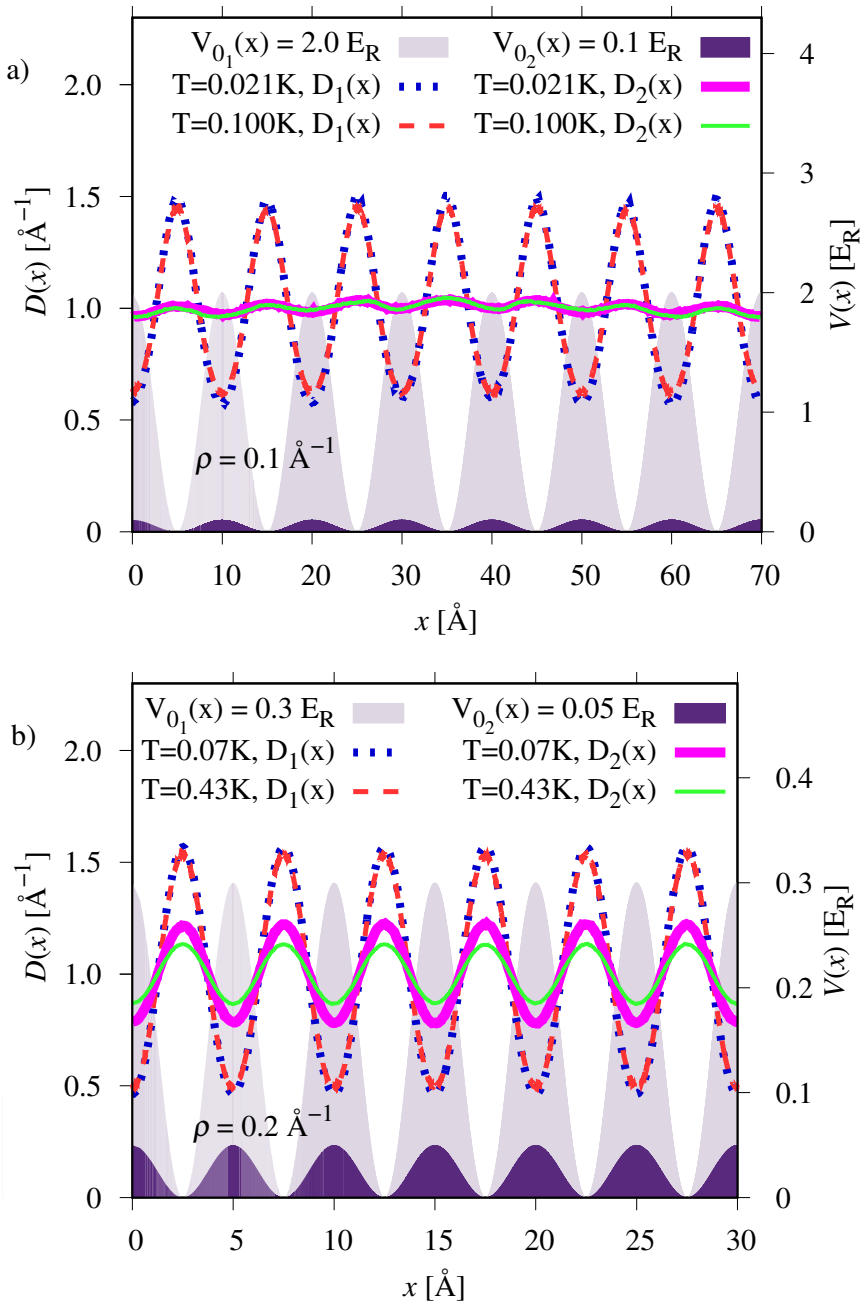
Graf. 3.11: PIMC rezultati procjene udjela suprafluida u ovisnosti o LT/a, $a = \pi(\hbar^2/m)\rho_0$, za četiri različite linijske gustoće: (a) $\rho_0 = 0.08$ Å^{-1}, (b) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1}, (c) $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} i (d) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}. Duljine L su dane u jedinicama Å, temperatura T u Kelvinima, a dubine optičke rešetke V_0 u E_R. Linije predstavljaju fitove teorijske funkcije (97) i prikazane su samo u slučajevima kada je χ^2 manji od 50. Za $T = 0$ K su dodani i odgovarajući DMC rezultati iz grafova 3.11 a)-d).

Radi boljeg razumijevanja sustava, na Grafu 3.13 su prikazani rezultati gustoće duž osi x za gustoće (a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i (b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}. Nacrtani su i vanjski potencijali odgovarajućih dubina. Dubine su iste kao i na grafovima 3.11b i 3.11d. Čak i za slučaj veće gustoće, $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}, profil gustoće je samo malo promijenjen usljed dubljeg vanjskog potencijala. Sustav nije lokaliziran bez obzira što je narušena suprafluidnost. Potpuna lokalizacija se dogodi tek pri $V_0 \approx 25\ E_R$ za gustoću $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1} pri $T = 0.066$ K (Graf 3.12). Prikazani su neki od

grafova profila za dvije temperature koje odgovaraju nižem i višem LT na grafovima 3.11b i 3.11d. S povećanjem se temperature smanjuju oscilacije profila gustoće.



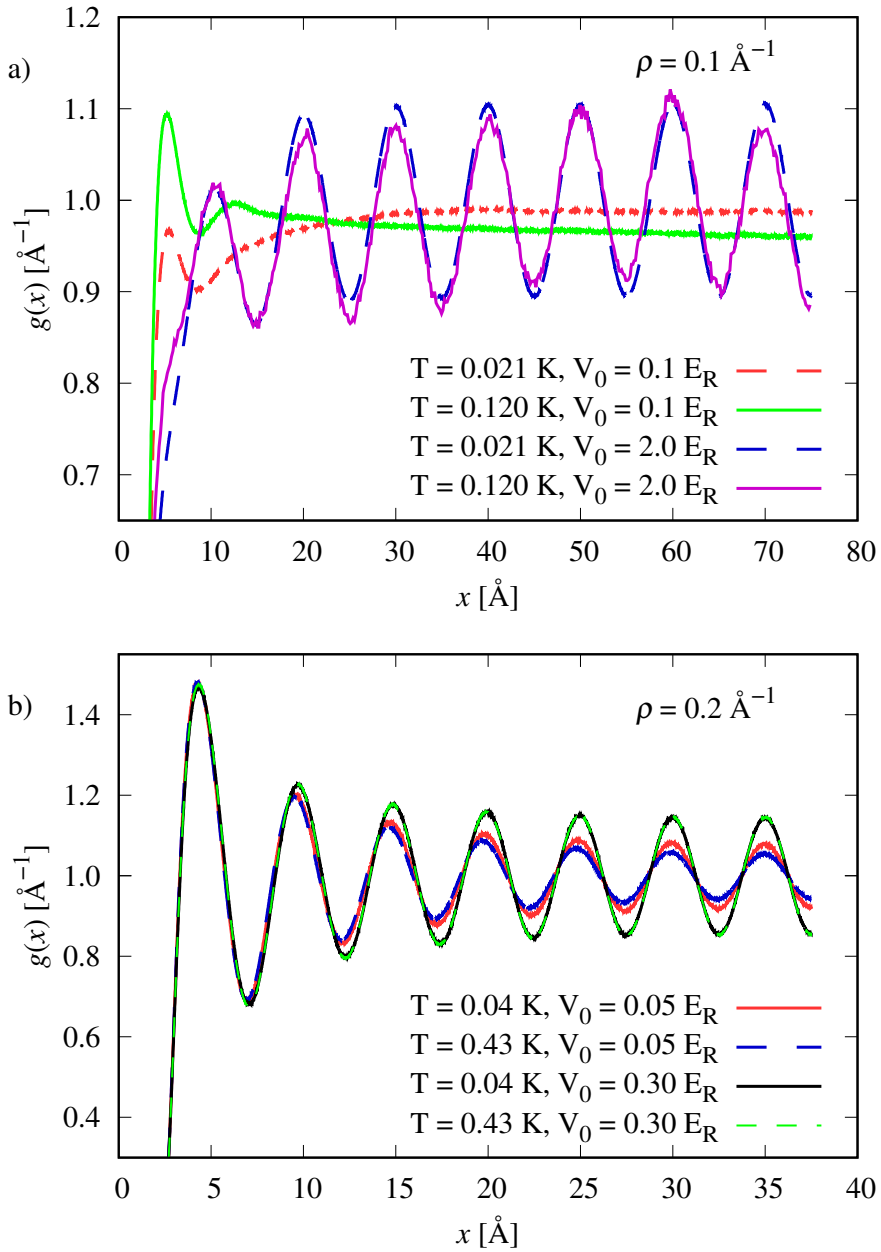
Graf. 3.12: PIMC rezultati profila gustoće $D(x)$ za linijsku gustoću $\rho_0 = 0.114$ Å^{-1}, pri $T = 0.066$ K za različite dubine potencijala. Potpuna lokalizacija se događa tek pri $V_0 \approx 25\ E_\mathrm{R}$.



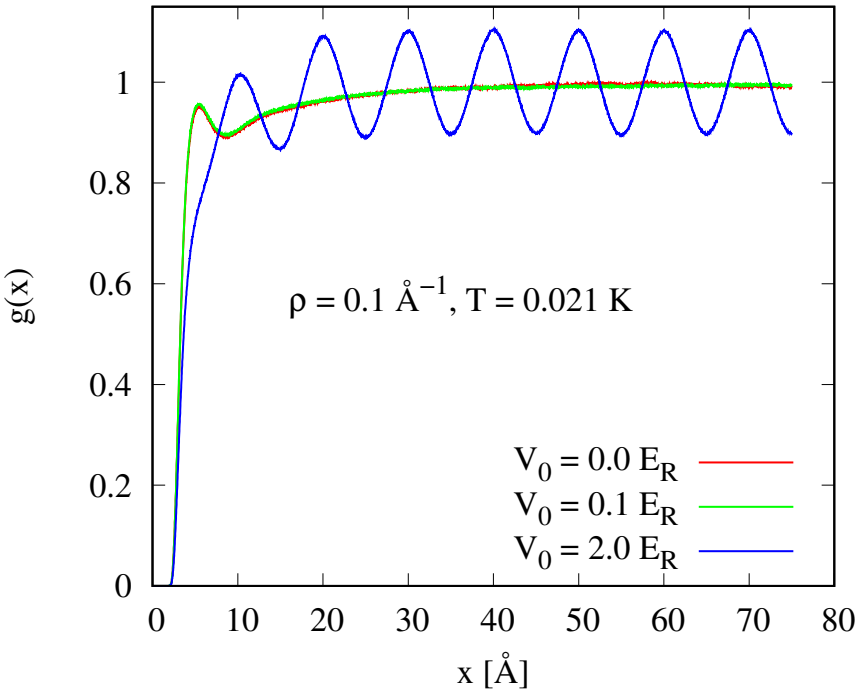
Graf. 3.13: PIMC rezultati profila gustoće $D(x)$ i optičke rešetke $V_{\text{ext}}(x)$ za dvije različite linijske gustoće: (a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i (b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}.

Na grafovima 3.14a i 3.14b su prikazani rezultati funkcija korelacije parova za dvije različite linijske gustoće (a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i (b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} i dvije različite dubine vanjskog potencijala kao i na grafovima 3.11. U slučaju gustoće $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} funkcije korelacije parova nema razlike pri plitkoj rešetki i bez rešetke, dok se za dublju rešetku pojave oscilacije koje odgovaraju vanjskom potencijalu, tj. maksimumi su na istim udaljenostima. Usporedba funkcija korelacija parova za gustoću $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} za slučaj duboke, plitke i bez rešetke pri

temperaturi $T = 0.021$ K je prikazana na Grafu 3.15. U slučaju veće gustoće, oscilacije koje su prisutne i za slučaj bez vanjskog potencijala jer je sustav u režimu kvazi-krutine, dodatno se povećavaju s rastom dubine periodičkog potencijala. Također, utjecaj temperature nije značajan. Linije se poklapaju.

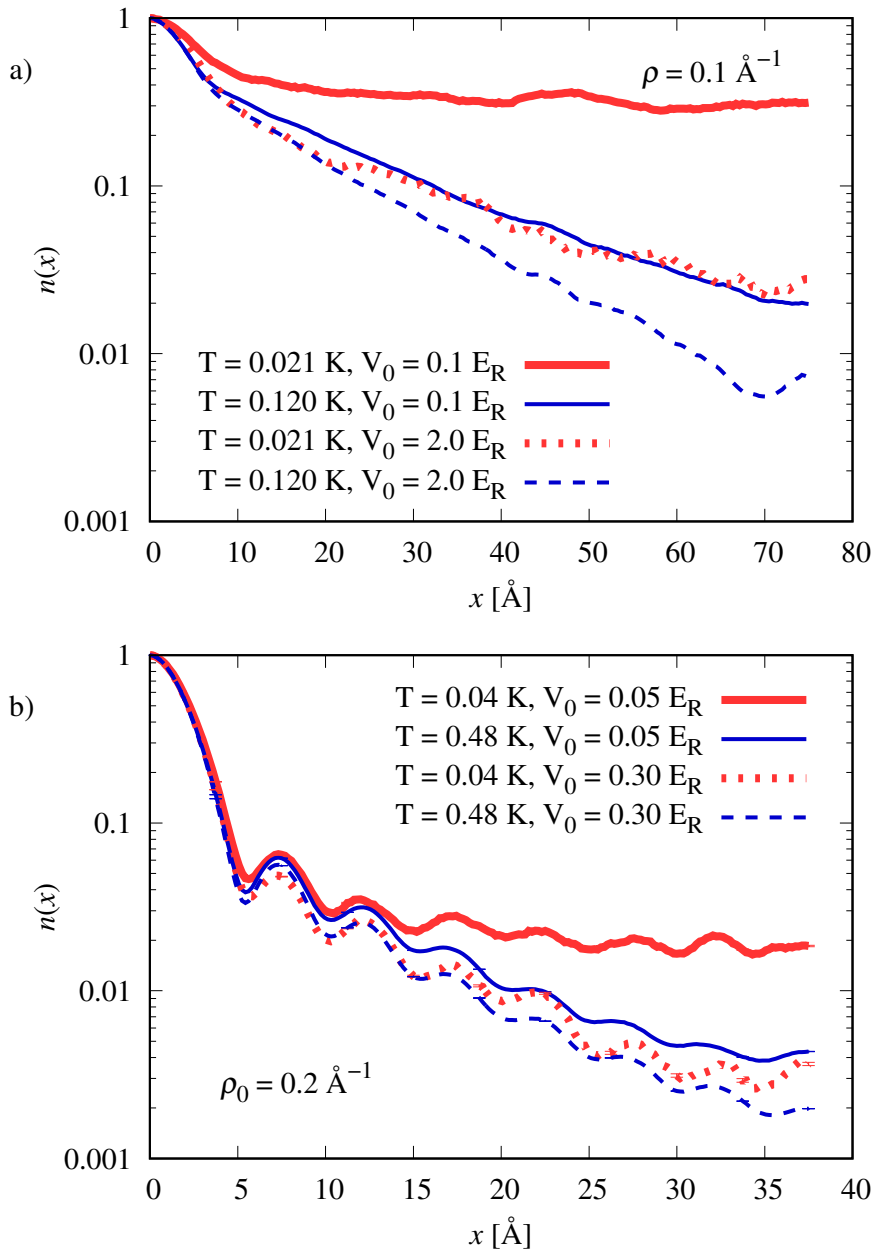


Graf. 3.14: PIMC rezultati funkcije korelacije parova $g(x)$ za dvije različite linijske gustoće: a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1}.



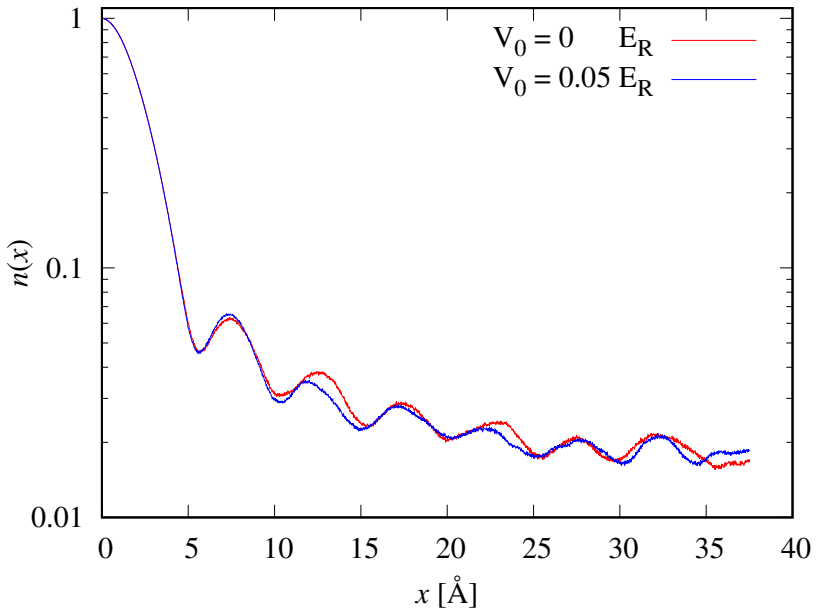
Graf. 3.15: Usporedba funkcija korelacija parova za gustoću $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} za slučaj duboke, plitke i bez rešetke pri temperaturi $T = 0.021$ K. Funkcije se poklapaju za slučaj bez rešetke i za slučaj s plitkom rešetkom dok duboka rešetka uzrokuje oscilacije.

Nadalje, izračunali smo i jednočestičnu matricu gustoće $n(x)$. Rezultati za odabrane dubine, linijske gustoće i temperature su prikazani na grafovima 3.16a i 3.16b. Kao i za slučaj funkcije korelacije parova, rezultati se ne razlikuju za slučaj bez vanjskog potencijala i za slučaj plitkog vanjskog potencijala. Povećanjem dubine V_0 pojavljuju se oscilacije u jednočestičnoj matrici gustoće koje odgovaraju periodičnom obliku vanjskog potencijala, $V_{\text{ext}}(x)$. U robusnom režimu (Graf 3.16a) za dubinu potencijala $V_0 = 0.1$ E_R i pri niskoj temperaturi $T = 0.021$ K jednočestična matrica gustoće opada algebarski s udaljenošću. To je očekivano ponašanje po LL teoriji jer je $L_T = 80$ Å. Za $x \gg L_T$ očekivano je da će jednočestična matrica gustoće opadati eksponencijalno što se i događa za slučaj više temperature $T = 0.21$ K kada je $L_T = 14$ Å. U slučaju veće gustoće, $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} (Graf 3.16b), kada je suprafluidnost osjetljiva na vanjski potencijal, opadanje nije eksponencijalno pri najnižoj temperaturi. Za sve ostale slučajeve kada je sustav u Mott izolator režimu, jednočestična matrica gustoće opada eksponencijalno. Temperaturni efekti pri dubljim potencijalima su mali.



Graf. 3.16: PIMC rezultati jednočestične matrice gustoće $n(x)$ za dvije različite linijske gustoće: a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} i različite temperature i dubine potencijala optičke rešetke.

Na Grafu 3.17 su uspoređeni rezultati jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, za uniformni slučaj bez vanjskog potencijala i sustav s plitkom ($V_0 = 0.05\ E_R$) rešetkom za najveću linijsku gustoću koju smo promatrali, $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} pri temperaturi $T = 0.04$ K. Može se zaključiti da plitka rešetka nema značajan utjecaj na jednočestičnu matricu gustoće.



Graf. 3.17: Usporedba rezultata jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, za uniformni slučaj bez vanjskog potencijala i sustav s plitkom ($V_0 = 0.05\ E_R$) rešetkom za gustoću $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} pri temperaturi $T = 0.04$ K.

Dodatno smo procijenili i statički strukturni faktor u 1D koji se definira kao

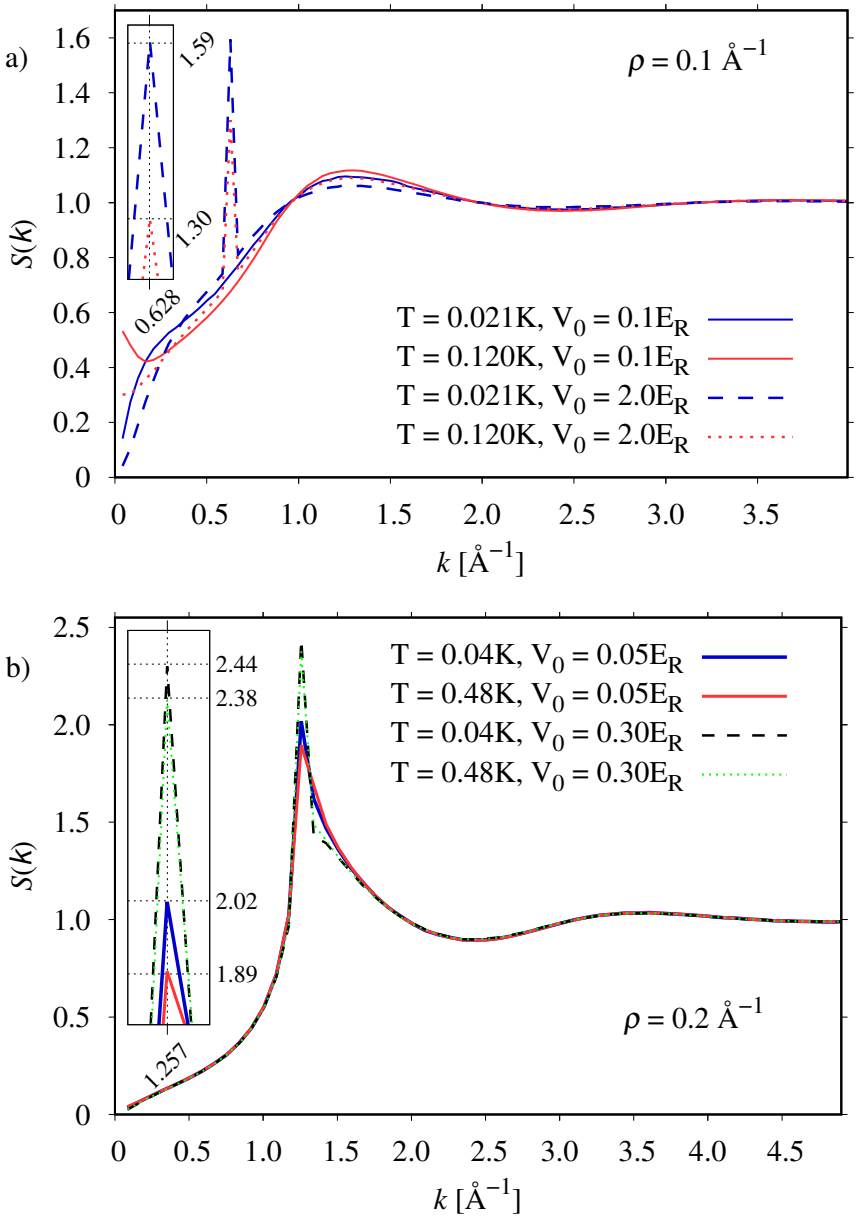
$$S(k) = \frac{1}{N}\langle \rho_k \rho_{-k} \rangle \tag{107}$$

gdje je $\rho_k = \sum_{i=1}^{N} e^{ikx_i}$ operator fluktuacija gustoće. Koristili smo izraz [108]

$$S(k_n) = \frac{1}{N}\left\langle \left(\sum_{i=0}^{N} cos(k_n x_i)\right)^2 + \left(\sum_{i=0}^{N} sin(k_n x_i)\right)^2 \right\rangle, \tag{108}$$

gdje je $k_n = 2\pi n/L$, $n = 1, 2, \ldots$, diskretiziran zbog periodičnih rubnih uvjeta. Očekujemo da će $S(k)$ imati maksimum za k koji odgovara optičkoj rešetki. Rezultati procjene statičkog strukturnog faktora, $S(k)$, za dvije linijske gustoće, dubine potencijala i temperature su prikazani na grafovima 3.18a i 3.18b. $S(k)$ za plitke potencijale se malo razlikuje u odnosu na slučaj bez vanjskog potencijala. Povećanjem temperature, strukturni faktor raste za male k. To se događa zbog toga što $g(x)$ opada eksponencijalno za velike udaljenosti x što uzrokuje član oblika $((2\pi)^2 + (L_T k)^2)^{-1}$ za male k. Efekt je vidljiv pri višim temperaturama jer je tada L_T manji. Pri obje gustoće se pojavljuje signal na $k = 2\pi\rho_0$ što odgovara valnom vektoru optičke rešetke, samo što se u slučaju gustoće $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} pojavljuje samo za dublju rešetku. Sličan signal je uočen u proračunima s tvrdim bozonima u jednoj dimenziji s periodičnom rešetkom [11]. Signal

se pojačava s dubljom rešetkom što je i očekivano jer je rešetka takva da se nalazi jedan atom po minimumu. U svim slučajevima je prisutna mala temperaturna ovisnost statičkog strukturnog faktora. Maksimum za valni vektor optičke rešetke smanjuje se s povećanjem temperature.



Graf. 3.18: PIMC rezultati statičkog strukturnog faktora $S(k)$ za dvije različite linijske gustoće: a) $\rho_0 = 0.1$ Å^{-1} i b) $\rho_0 = 0.2$ Å^{-1} i različite temperature i dubine potencijala optičke rešetke. Umetci prikazuju uvećani maksimum od $S(k)$.

4 PRIJELAZ IZ JEDNODIMENZIONALNOG U DVODIMENZIONALNI SUSTAV TEKUĆEG ^{4}He U NANOPORI

Naš cilj u ovom podpoglavlju je pokazati prijelaz iz jednodimenzionalnog kvantnog sustava u dvodimenzionalni bez promjene potencijala već samo promjenom linijske gustoće sustava. Dakle, uočiti promjenu ovisnosti suprafluidnosti i jednočestične matrice gustoće iz jednodimenzionalne u ovisnosti karakterisične za dvodimenzionalne sustave.

4.1 Metoda i model nanopore

Simulirali smo sustav tekućeg helija ^{4}He u nanopori radijusa $R = 4$ Å opisan hamiltonijanom

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i<j}^{N}U(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N}V(r_{\perp i}), \tag{109}$$

gdje je N broj ^{4}He atoma mase m, $U(r)$ je međuatomska interakcija opisana Azizovim potencijalom [96] i $V(r_\perp)$ je vanjski potencijal induciran nanoporom i amorfnim dijelom helija nakupljenim uz rub pore. $r_\perp$ je udaljenost od centra nanopore.

Svojstva sustva pri temperaturi $T = 0$ K kao što su energija osnovnog stanja, profili gustoća i funkcija korelacije parova proračunali smo DMC metodom. Početna valna funkcija je konstruirana kao umnožak jednočestičnih i dvočestičnih korelacija

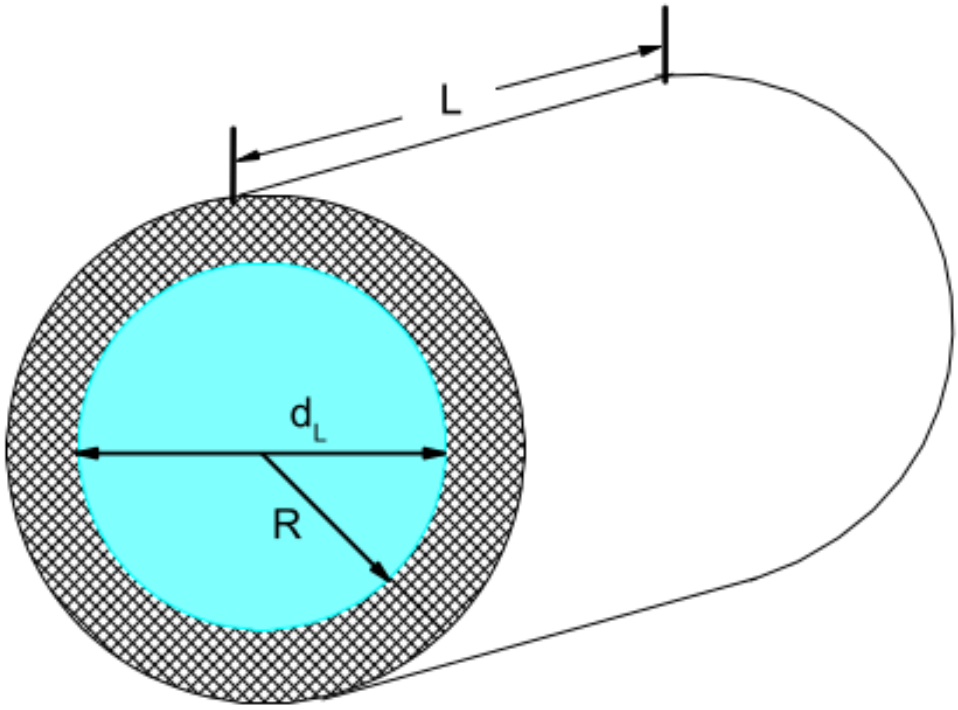
$$\Psi = \prod_{i<j} f(r_{ij})\phi(r_{\perp i}), \tag{110}$$

gdje je $f(r) = \exp(-(b/r)^5)$, a $\phi(r_\perp)$ egzaktno jednočestično rješenje unutar potencijala $V(r_\perp)$. Početna valna funkcija oblika (110) je uobičajena za probleme helija u ograničenom prostoru.

Svojstva sustava kao što su udio suprafluida, funkcija korelacije parova i jednočestična matrica gustoće, $n(x)$, pri konačnim temperaturama smo proračunali PIMC metodom s worm algoritmom. Koristili smo iste vrijednosti koraka u imaginarnom vremenu kao i u ref. [25], $\tau = 0.004 - 0.005$ K^{-1}. Također, koristili smo optimalne vrijednosti parametara IMD i C kao što je predstavljeno u prethodnim poglavljima. Udaljenost glave i repa je 10 % duljine polimera,

$IMD = M/10$, a C je takav da sustav provodi $50-70$ % računalnog vremena u G-sektoru.

^{4}He ima afinitet da se dio atoma skuplja uz stijenku nanopore [109]. Taj inertni sloj helija je uglavnom amorfan, a debljina sloja se procjenjuje na oko $5-6$ Å [110, 111]. Petpostavka je da taj amorfni sloj helija ne utječe na suprafluidna svojstva tekućeg helija koji zauzima ostatak pore. Dakle, dovoljno je kvantnim Monte Carlo simulacijama proračunati samo tekući dio koji je okružen inertnim amorfnim helijem nakupljenim uz rub pore. U ovom radu radijus nanopore označavao s R i to se odnosi na radijus tekućeg helija, bez amorfnog dijela (Slika 4.1). Ovaj model ranije je korišten u ref. [25, 26].



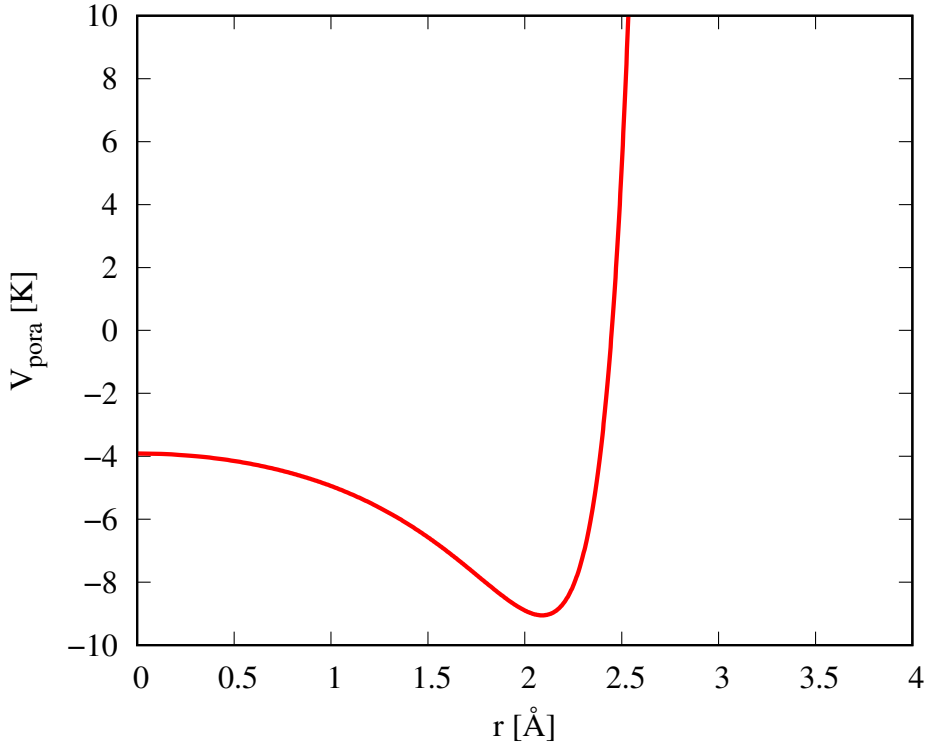
Slika. 4.1: Ilustracija nanopore. Na unutarnjoj površini pore se nakuplja helij u amorfnom obliku (zatamnjeni dio). Ostatak helija u pori je u tekućoj fazi radijusa R. Ilustracija je preuzeta iz ref. [25].

Dakle, simuliramo samo tekući dio helija koji je okružen inertnim helijem fiksiranim na unutrašnjoj površini pore debljine 5 Å. Ostaje još pronaći efektivni vanjski potencijal u kojem se nalazi tekući helij, a kojeg inducira amorfni dio helija. Oblik potencijala je procijenjen iz integracije Lennard-Jonesovog potencijala interakcije između ^{4}He atoma po volumenu pore: [25]

$$V(\rho) = 3\varepsilon n\pi\sigma^6 \int_R^{R_i} \rho_s d\rho_s \int_0^{\pi} d\phi_s \times \left[\frac{21}{32}\frac{\sigma^6}{(\rho^2+\rho_s^2-2\rho\rho_s cos\phi_s)^{11/2}} - \frac{1}{(\rho^2+\rho_s^2-2\rho\rho_s cos\phi_s)^{5/2}}\right], \quad (111)$$

gdje je $\sigma = 2.2$ Å, $\varepsilon = 3$ K, $n = 0.078$ Å^{-3}, a medij se nalazi u području od R, radijus tekućeg dijela, do R_i. Integral se rješava numerički do $R_i = 3R$.

Oblik vanjskog potencijala u kojem se nalazi tekući helij induciranog od amorfnog dijela helija i pore je prikazan na Grafu 4.1.



Graf. 4.1: Efektivni potencijal pore i amorfnog dijela helija nakupljenog uz unutarnji rub pore u kojem se nalazi tekući helij kojeg simuliramo kvantnim Monte Carlo simulacijama. Potencijal se izračuna numeričkim rješavanjem izraza (111).

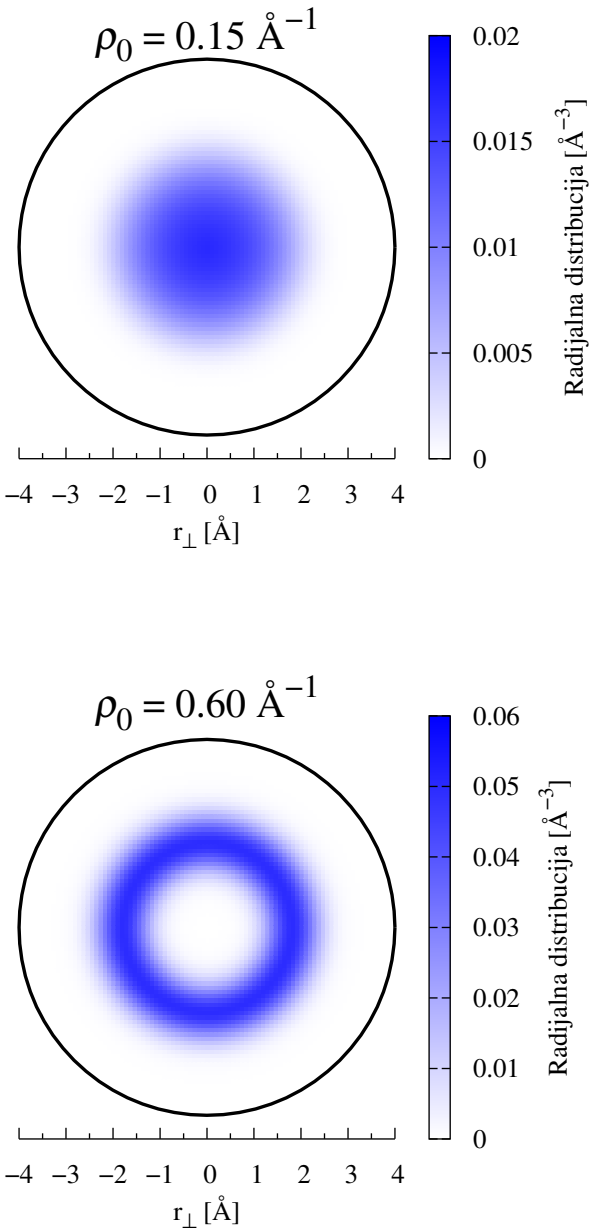
U širim nanoporama, pri tlaku zasićene pare, gustoća tekućeg helija je $\rho = 0.0218$ Å^{-3} što je isto ili približno kao u uobičajenom trodimenzionalnom slučaju. Tada je međuatomska udaljenost $a_0 \approx 3.7$ Å. Ravnotežna gustoća helija raspoređenog u jednodimenzionalnoj liniji je znatno manja. Naprimjer, u ravnoteži, pri nultom tlaku gustoća ^{4}He atoma je $\rho_0(eq) = 0.036$ Å^{-1} [18, 19, 21], dok je spinodalna gustoća takvog sustava $\rho_0(eq) = 0.026$ Å^{-1} [21]. U slučaju nultog tlaka, srednja međuatomska udaljenost je $a_0 \approx 27.8$ Å. Slično, ravnotežna gustoća dvodi-

menzionalnog ^{4}He filma je $\rho_{2D} = 0.0432$ Å^{-2} i u tom slučaju je međuatomska udaljenost $a_0 \approx 5.17$ Å [112, 113]. U uskim nanoporama, helij ima karakter jednodimenzionalog ili dvodimentionalnog sustava stoga očekujemo znatno niže ravnotežne gustoće u odnosu na one u širokim porama. Trebao bi biti navrnut tlak na uske pore kako bi se postigle gustoće koje helij ima u uobičajenom trodimenzionalnom slučaju.

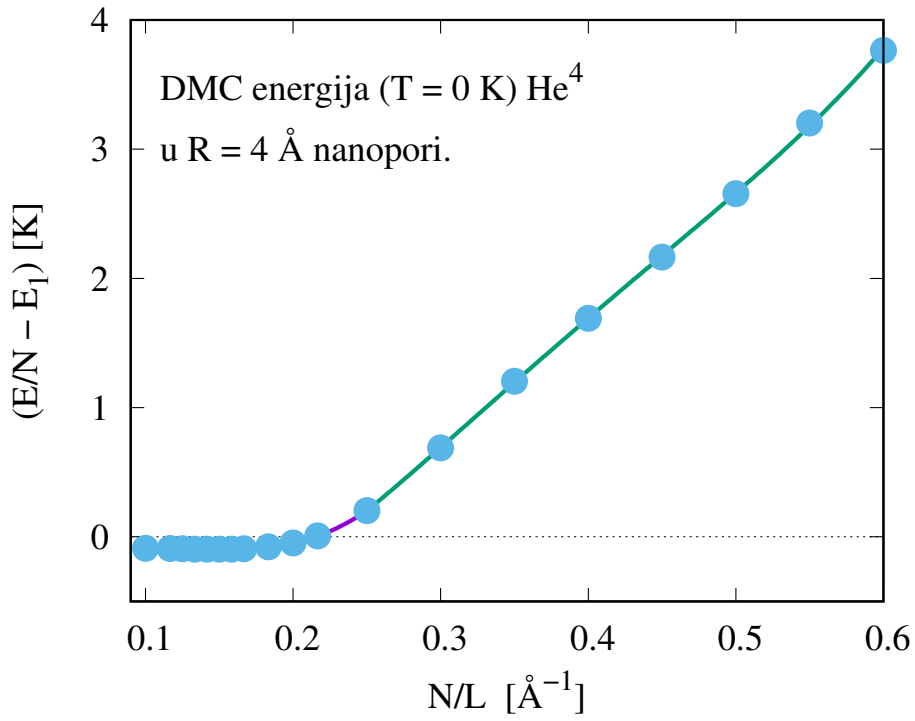
4.2 Rezultati

Na Grafu 4.3 su prikazani rezultati ovisnosti energije osnovnog stanja, E/N, o linearnoj gustoći, $\rho_0 = N/L$, tekućeg helija ^{4}He unutar pore radijusa $R = 4$ Å. Pri niskim gustoćama helij je distribuiran po liniji u sredini pore. Energija ima plitki i široki minimum oko linijske gustoće $\rho_0(eq) = 0.15$ Å^{-1}, što je ravnotežna gustoća. Ova ravnotežna gustoća je malo veća, ali slična, ravnotežnoj gustoći slobodnih atoma u liniji ($\rho_0 = 0.036$ Å^{-1}) koju smo prethodno spomenuli. To se može objasniti time što se atomi u kvazi-jednodimenzionalnom slučaju mogu gibati okomito na centralnu liniju pore zbog efektivne interakcije s unutarnjim rubom pore, tj. amorfiziranim helijem. Minimalna energija po atomu je $E/N = -95$ mK što je znatno niže od energije u slučaju slobodnih atoma u jednodimenzionalnoj liniji, $E/N = -3.6 \pm 0.2$ mK [114], zbog prirode interakcije s rubom pore (Graf 4.1). U slučaju malo uže pore, $R = 3$ Å, minimalna energija je $E/N = -14$ mK, a ravnotežna gustoća $\rho_0 = 0.108$ Å^{-1}. Veća minimalna energija i veća ravnotežna gustoća je uočena u nekim kvazi-jednodimenzionalnim sustavima kao što je helij ^{4}He unutar karbonskih nanocjevčica [114]. Tekućina pri spinodalnoj gustoći, $\rho(sp) \approx 0.135$ Å^{-1}, postaje nestabilna te se razbija u kapljice. Ipak, ravnotežna gustoća je blizu spinodalne. S druge strane, pri višim gustoćama, iznad $\rho_0 \geq 0.3$ Å^{-1}, energija raste aproksimativno linearno s gustoćom. To nije očekivano za jednofazni sustav. Linearni rast energije s linijskom gustoćom ukazuje na to da dolazi do neke druge promjene. Promjena do koje dolazi je vidljiva na Grafu 4.4. Ako promotrimo profile gustoće, uočavamo da dolazi do promjene u profilu gustoće kako se povećava linijska gustoća ρ_0 od 0.250 Å^{-1} do 0.600 Å^{-1}. Pri niskoj linijskoj gustoći, helij je distribuiran oko centralne linije nanopore s maksimumom na samoj liniji, $r_\perp$, a pri visokoj linijskoj gustoći je distribuiran cilindrično oko centra nanopore s maksimumom na $r_\perp \approx 1.5 - 2.0$ Å. $r_\perp$ je koordinata udaljenosti od centralne linije nanopore. S povećanjem linijske gustoće, gustoća u centru pore se smanjuje, a maksimum se povećava. Raspon gustoća na Grafu 4.3 gdje energija, E/N, ima približno linearan rast je raspon linijskih gustoća pri kojima dolazi do

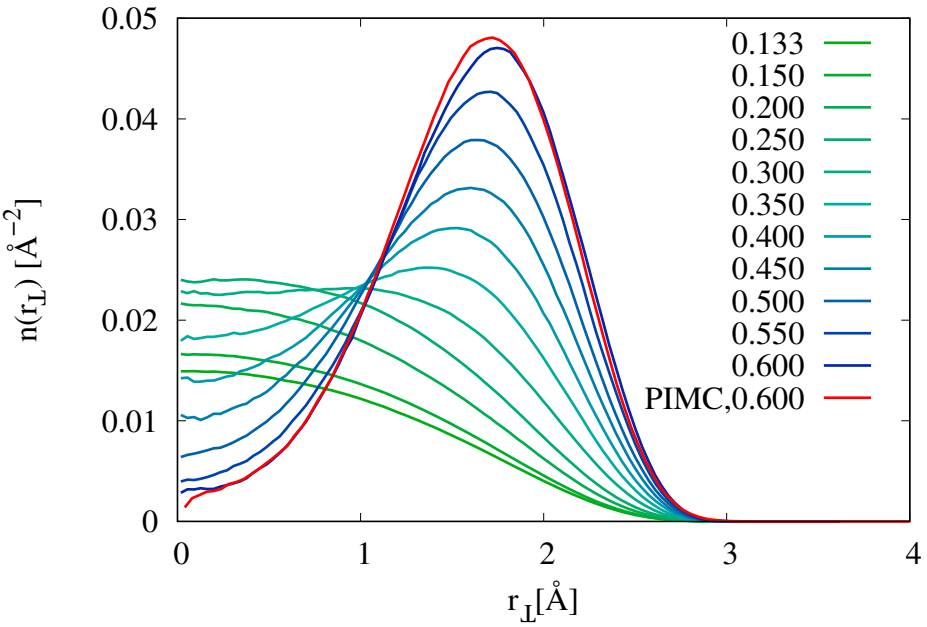
prijelaza iz jednodimenzionalnog linijskog sustava u dvodimenzionalni cilindrični sustav (Graf 4.2).



Graf. 4.2: Distribucija gustoće tekućeg ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å. Gore je prikazan slučaj za nižu linijsku gustoću $\rho_0 = 0.15$ Å^{-1}. Gustoća se raspodjelila na liniji duž nanopore s maksimumom raspodjele u sredini. Dolje je prikazan slučaj s velikom linijskom gustoćom $\rho_0 = 0.60$ Å^{-1}. Helij se raspodijelio u dvodimenzionalni cilindar oko sredine nanopore.

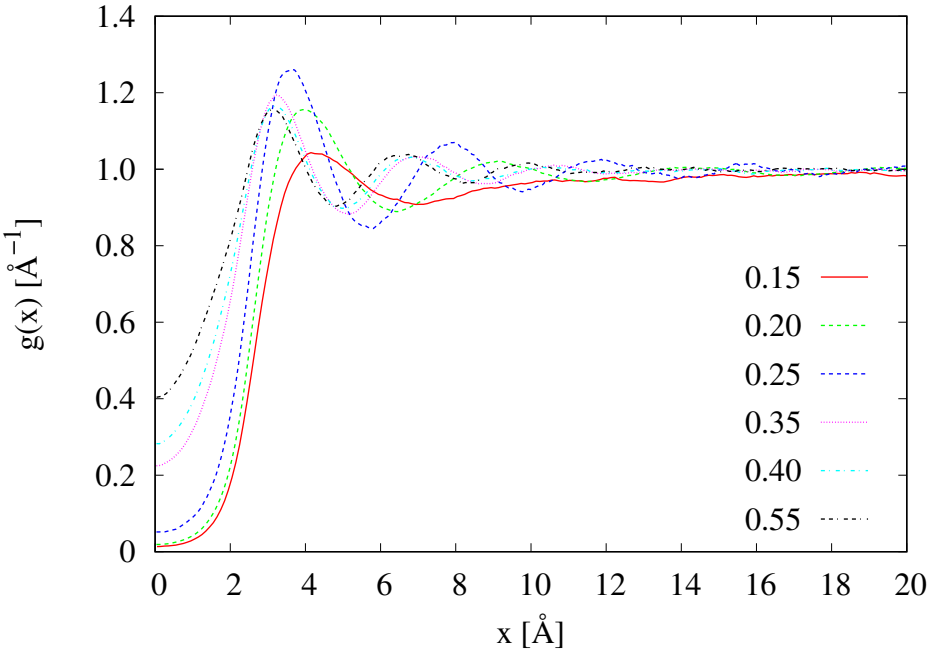


Graf. 4.3: Energija osnovnog stanja, E/N, tekućine ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å u ovisnosti o linearnoj gustoći tekućine, $\rho_0 = N/L$. Linija počinje od spinodalne linijske gustoće, $\rho_0(sp) = 0.083$ Å^{-1}. Energija ima široki i plitki minimum, $E/N = -95$ mK po atomu, pri ravnotežnoj gustoći $\rho_0(eq) = 0.15$ Å^{-1}. Linerani rast energije u rasponu od $\rho_0 \in [0.25$ Å^{-1}, 0.60Å$^{-1}]$ ukazuje na prijelaz iz jednodimenzionalne linijske tekućine u dvodimenzionalnu cilindričnu.



Graf. 4.4: Profili gustoće, $n(r_\perp)$ tekućeg helija ^{4}He, u ovisnosti o udaljenosti od centralne linije nanopore, $r_\perp$, unutar nanopore radijusa $R = 4$Å pri različitim linijskim gustoćama, $0.133 < \rho_0 < 0.6$ Å^{-1}. Profili su procijenjeni pomoću DMC-a osim rezultata predstavljenog crvenom linijom koji je procijenjen pomoću PIMC-a. Na rezultatima je vidljiv prijelaz iz jednodimenzionalnog linijskog sustava pri nižim gustoćama u dvodimenzionalni cilindrični sustav pri višim gustoćama. Jednodimenzionalni sustav ima maksimum gustoće na samoj centralnoj liniji pore, dok cilindrični ima maksimum na $r_\perp \approx 1.5 - 2.0$ Å. Prijelaz se događa pri linijskoj gustoći $\rho_0 \simeq 0.30 - 0.40$ Å^{-1}.

Na Grafu 4.5 su prikazani rezultati procjene ^{4}He-^{4}He funkcije korelacije parova, $g(x)$, duž osi koja se proteže duž centralne linije nanopore. Prikazani su rezultati za različite linijske gustoće, ρ_0. Pri gustoći $\rho_0 = 0.15$ Å^{-1}, funkcija korelacije parova, $g(x)$, ima oblik karakterističan jednodimenzionalnom sustavu, odnosno vrlo sličan onome u jednoj dimenziji. Pri malim udaljenostima, x, funkcija korelacije parova ide u nulu. To se događa zbog toga što atomi ne mogu prodirati jedan u drugoga zbog hard-core dijela potencijala. Osim toga što je $g(0) = 0$, funkcija korelacije parova, $g(x)$, ima umjerene oscilacije očekivane za jednodimenzionalni sustav. Oscilacije se povećavaju i dosežu do većih udaljenosti kako se linijska gustoća povećava. Nakon prijelaza u dvodimenzionalni cilindar, funkcija korelacije parova više nije nula pri $x \to 0$ kao što je bilo u slučaju jednodimenzionalne linijske raspodjele.

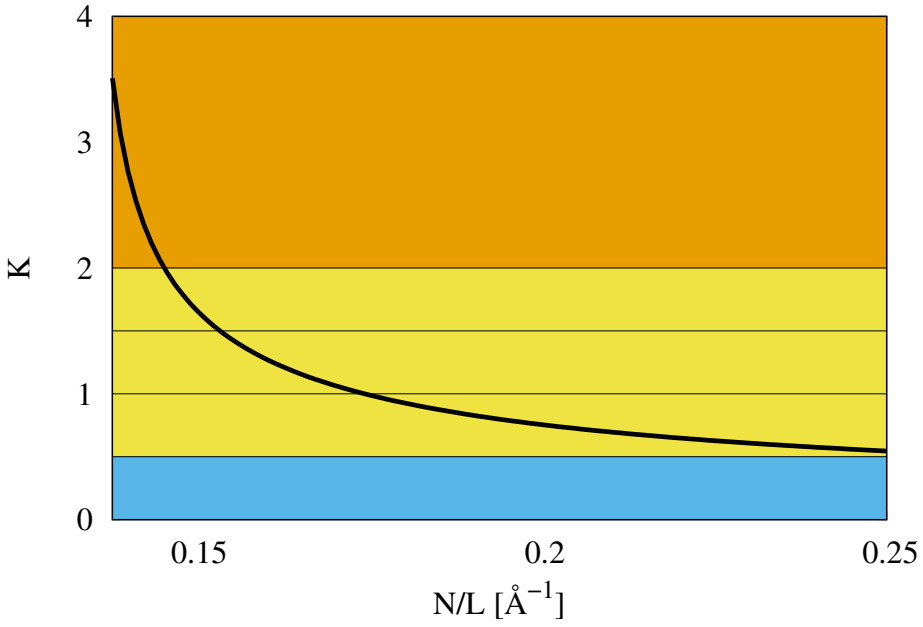


Graf. 4.5: Funkcija korelacije parova, $g(x)$, tekućeg helija ^{4}He duž osi koja se proteže duž centralne linije nanopore radijusa $R = 4$ Å pri rasponu linearne gustoće $0.15 \geq \rho_0 \geq 0.55$ Å^{-1}. Pri niskim gustoćama, kada je sustav jednodimenzionalan, $g(x)$ ima oblik karakterističan za jednodimenzionalni sustav. Funkcija korelacije parova je nula pri malim udaljenostima zbog odbojnog dijela međuatomskog potencijala i ima umjerene oscilacije pri višim gustoćama. Kako se gustoća povećava, oscilacije rastu i dosežu do većih udaljenosti i $g(x)$ ima konačnu vrijednost kada x teži u nulu što je očekivano za dvodimenzionalni cilindrični sustav kao što je prikazano na Grafu 4.2.

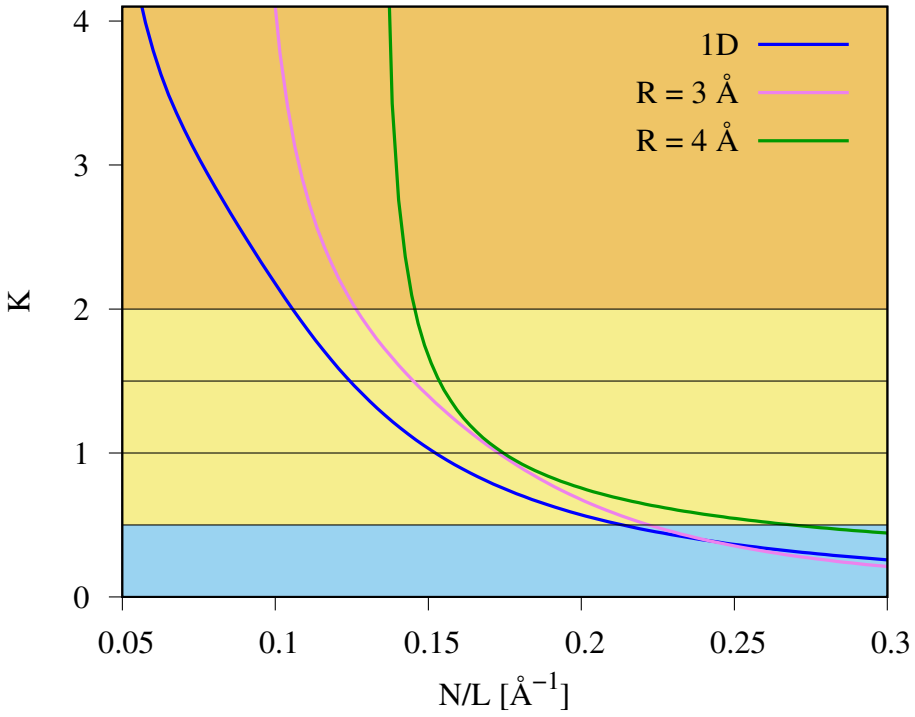
Iz dosada predstavljenih rezultata, možemo zaključiti da tekući helij ^{4}He radijusa $R = 4$ Å unutar nanopore radijusa $r = 10$ Å sa slojem amorfnog helija uz rub pore debljine 5 Å ima svojstva jednodimenzionalne tekućine pri niskim linijskim gustoćama, do $\rho_0 \approx 0.25 - 0.30$ Å^{-1}. Za veće gustoće, tekući helij ima svojstva dvodimenzionalne tekućine.

Na Grafu 4.6 je prikazana ovisnost Luttingerova parametra, K, u ovisnosti o linijskoj gustoći sustava za niske gustoće u rasponu od 0.1 Å$^{-1} < \rho_0 < 0.25$ Å^{-1}. Rezultat je procijenjen iz jednadžbe stanja izračunate DMC-om. Ovisnost Luttingerova parametra, K, ima ovisnost o linijskoj gustoći, ρ_0, karakterističan za jednodimenzionalni sustav. Slična ovisnost parametra K je procijenjena i u ref. [26] u kojem su autori proučavali sustav unutar uže nanopore gdje je sustav jednodimenzionalan za sve gustoće.

Zanimljivo je stoga usporediti dobivene ovisnosti za sustav koji je čisto 1D, helij u nanopori radijusa $R = 3$ Å [26] i $R = 4$ Å. Tri su krivulje prikazane na Grafu 4.7. Primjećujemo da se ovisno o gustoći u sva tri promatrana slučaja helij može naći u režimu robusnog suprafluida, fragilnog suprafluida i kvazi-krutine. Što je sustav jače samovezan, odnosno što ima veću $|E/N|$ ima i veću ravnotežnu te spinodalnu gustoću. Kako se sustav približava spinodalnoj gustoći kompresibilnost mu teži u beskonačnost, što dovodi do divergencije Luttingerovog parametra. Spinodalne gustoće su redom $\rho_0(1D) \approx 0.038$ Å^{-1}, $\rho_0(R = 3\text{ Å}) \approx 0.09$ Å^{-1} i $\rho_0(R = 4$ Å$) \approx 0.135$ Å^{-1}.



Graf. 4.6: Ovisnost Luttingerova parametra, K, tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å u ovisnosti o linijskoj gustoći $\rho_0 = N/L$ pri niskim gustoćama za koje sustav pokazuje jednodimenzionalna svojstva. K je procijenjen iz jednadžbe stanja, $e = E/N$, kao $K = (v_J^0/v_N)^{1/2} = [\pi^2(\frac{\hbar^2}{m})\rho_0^3\kappa]^{1/2}$ gdje je κ kompresibilnost, $\kappa^{-1} = \rho_0\partial[\rho_0^2\partial e/\partial\rho_0]/\partial\rho_0$.



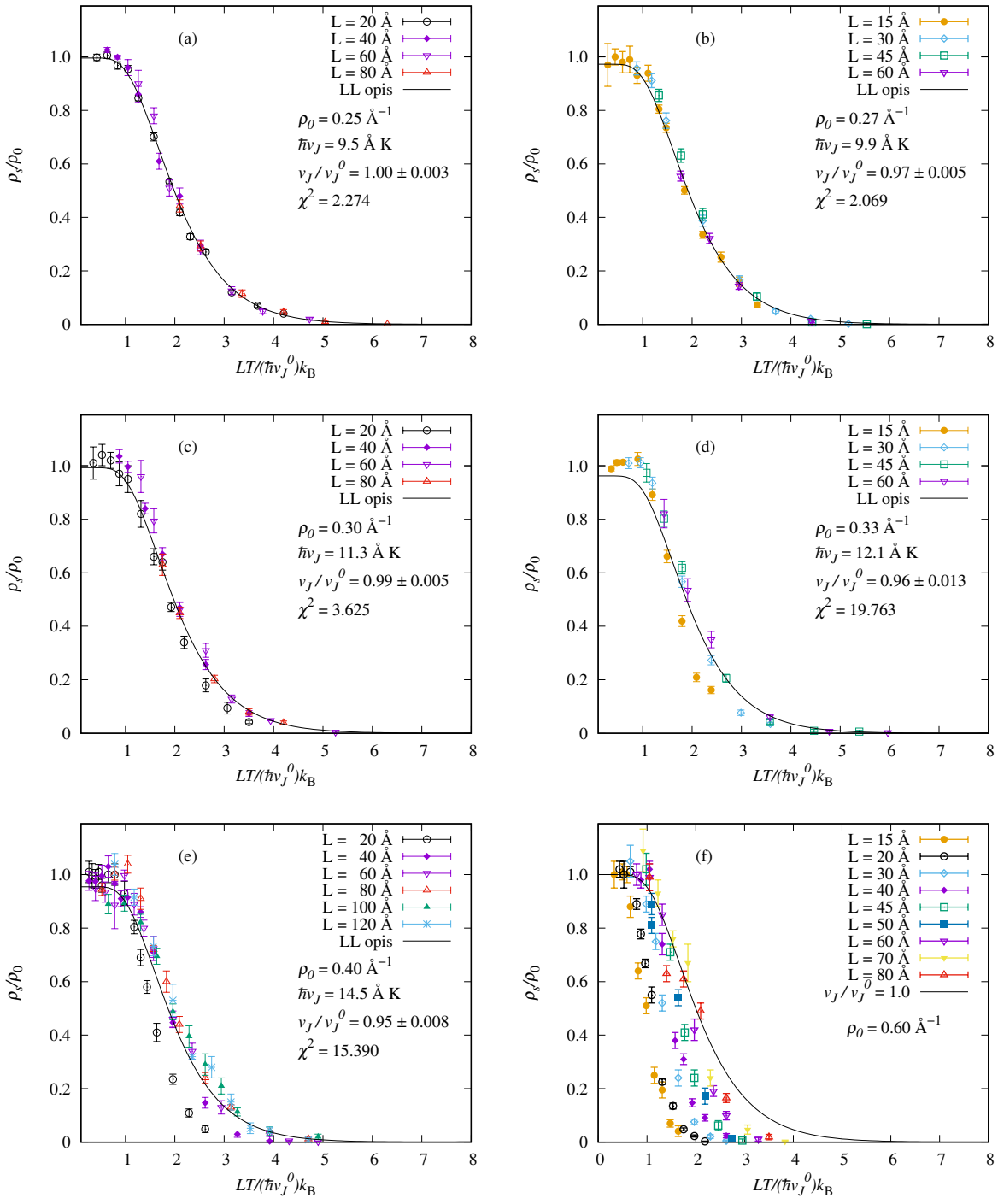
Graf. 4.7: Usporedba ovisnosti Luttingerova parametra, K, tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å, $R = 3$ Å [26] i čistog jednodimenzionalnog ^{4}He u ovisnosti o linijskoj gustoći $\rho_0 = N/L$.

Na grafovima 4.8 su prikazani rezultati procjene ovisnosti udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, o umnošku duljine i temprature, LT. Slično kao i rezultati na grafovima 3.11. Rezultati su dobiveni pomoću estimatora namotaja implementiranog u PIMC metodu. Proračune smo izvršili za šest različitih linijskih gustoća: $\rho_0 = 0.25, 0.27, 0.30, 0.33, 0.40, 0.60$ Å^{-1}. Također, prikazane su i krivulje koje predstavljaju fitove LL teorijskog opisa ovisnosti udjela suprafluida o umnošku duljine i temperature, LT. LL opis udjela suprafluida o LT je dan u izrazu (97). Za gustoće manje od $\rho_0 = 0.30$ Å^{-1}, udio suprafluida, ρ_S/ρ_0, skalira s LT i predviđanja PIMC-a poklapaju se s LL teorijskim opisom, što je i očekivano za jednodimenzionalne sustave.

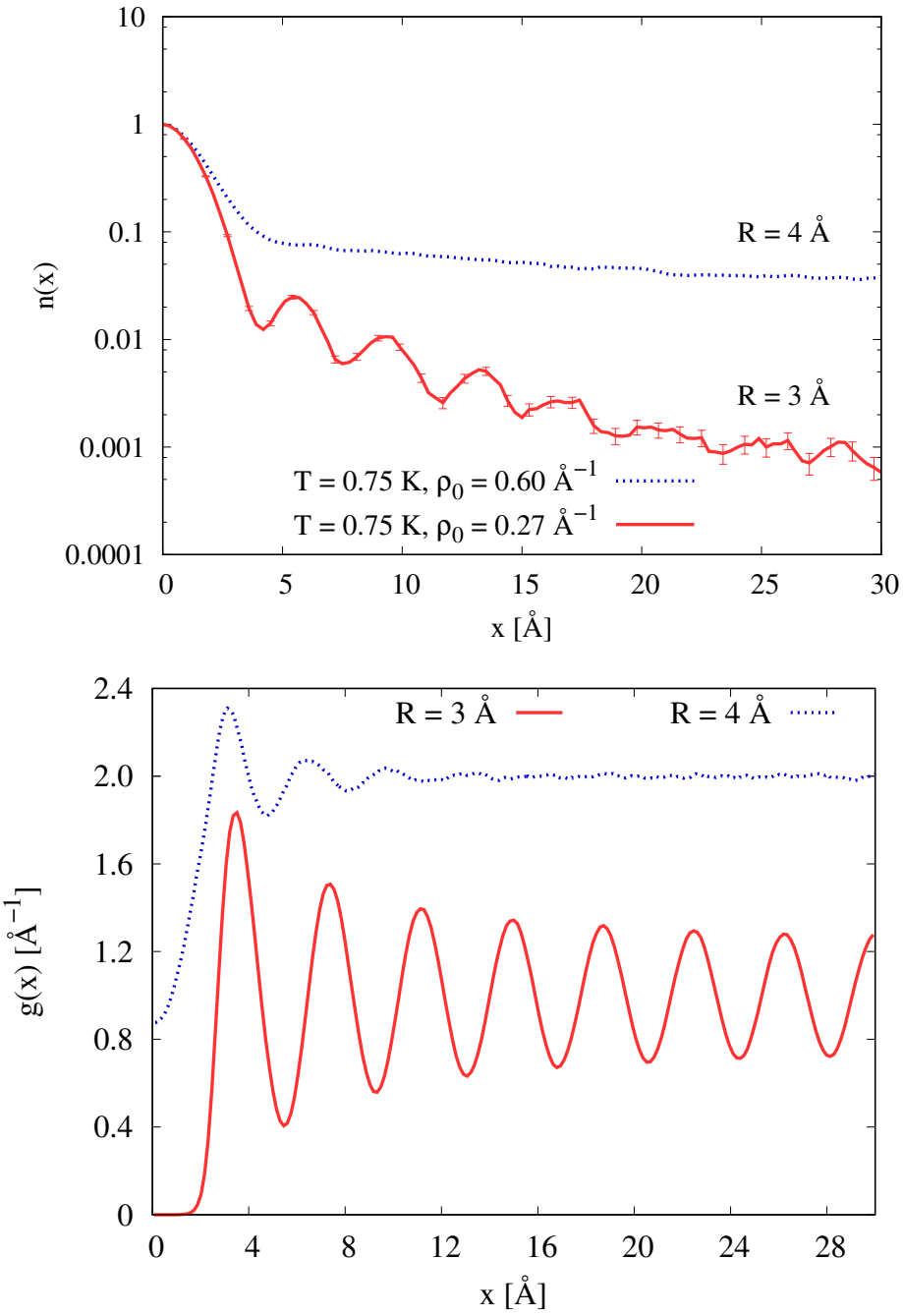
Za gustoće veće od $\rho_0 \geq 0.33$ Å^{-1} teorijski LL opis ovisnosti udjela suprafluida o LT, $\rho_S(LT)/\rho_0$, više nije pouzdan. To je indikacija da suprafluidnost tekućine više nema svojstva jednodimenzionalnog sustava što sugerira prelazak u dvodimenzionalnu tekućinu pri višim linijskim gustoćama. Pri gustoći $\rho_0 = 0.60$ Å^{-1} je očito da suprafluidnost više ne skalira s LT. Iz profila gustoće je jasno da sustav pri toj gustoći ima dvodimenzionalnu cilindričnu simetriju. Na Grafu 4.8(f) puna linija ne predstavlja fit LL izraza za opis ovisnosti suprafluida o LT već

LL predviđanje u slučaju kada je $v_J = v_J^0$. Očito je da takva linija ne odgovara opisu PIMC rezultata za ovisnost ρ_S/ρ_0 o LT.

Zanimljivo je primijetiti da se rezultati za udio suprafluida kao funkcije od LT dobiveni za različite duljine nanopore L više približavaju za veće L nego za manje. To bi moglo značiti da ovisnost suprafluidnosti ipak skalira s LT, ali za velike duljine L. To bismo mogli interpretirati kao dugi cilindar čiji je radijus puno manji od duljine pa suprafluidnost ipak poprima karakteristike jednodimenzionalnog sustava.



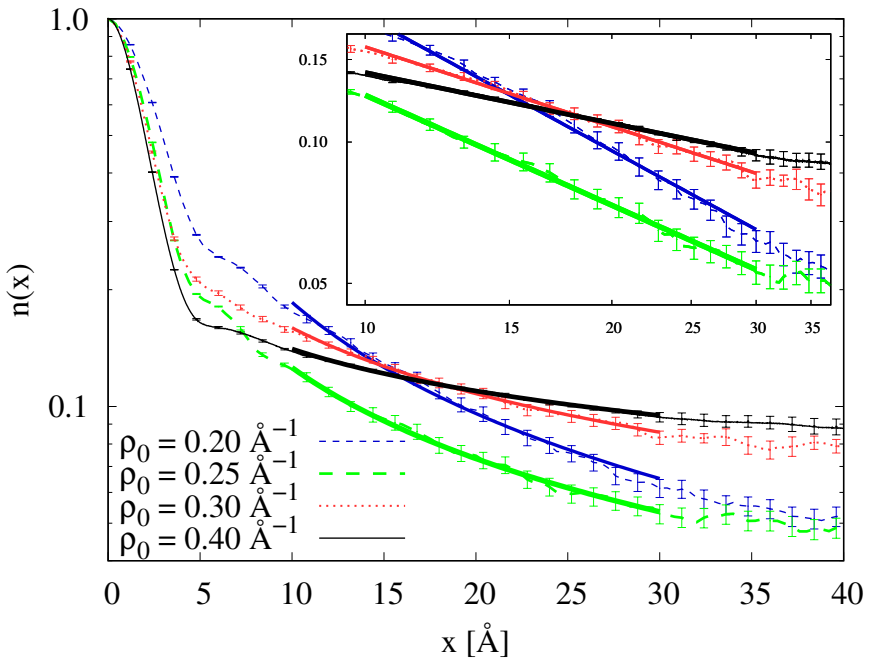
Graf. 4.8: Ovisnost udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, o LT tekućeg ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å pri linijskim gustoćama između $\rho_0 = 0.25$ Å^{-1} i 0.60 Å^{-1}. Pri niskim gustoćama do $\rho_0 = 0.30$ Å^{-1}, tekućina je jednodimenzionalna i ρ_S/ρ_0 je u skladu s LL opisom. Fit LL opisa ima mali χ^2 i ρ_S/ρ_0 skalira s $L/\hbar\beta v_J^0 = LT/(\hbar^2/k_B m)\pi\rho_0$. Pri $\rho_0 = 0.4$ Å^{-1} i 0.6 Å^{-1} tekućina je dvodimenzionalna i fit LL opisa ima veliki χ^2.



Graf. 4.9: Usporedba jednočestične matrice gustoće $n(x)$ i funkcija korelacije parova $g(x)$ tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 3$ Å i $R = 4$ Å. U oba slučaja je trodimenzionalna gustoća jednaka i slična je onoj u trodimenzionalnom slučaju tekućeg helija, $\rho' = 0.0212 \approx 0.0218$ Å^{-3}. U nanopori manjeg radijusa, u kojoj je helij ^{4}He pokazuje svojstva jednodimenzionalnog sustava bez obzira na gustoću, jednočestična matrica gustoće i funkcija korelacije parova imaju dugodosežne oscilacije karakteristične za jednodimenzionalnu tekućinu. U slučaju šire nanopore radijusa $R = 4$ Å, u kojoj helij ^{4}He formira cilindrični film, jednočestična matrica gustoće ima glatki algebarski rep, a funkcija korelacije parova ima kratkodosežne oscilacije karakteristične za dvodimenzionalni sustav.

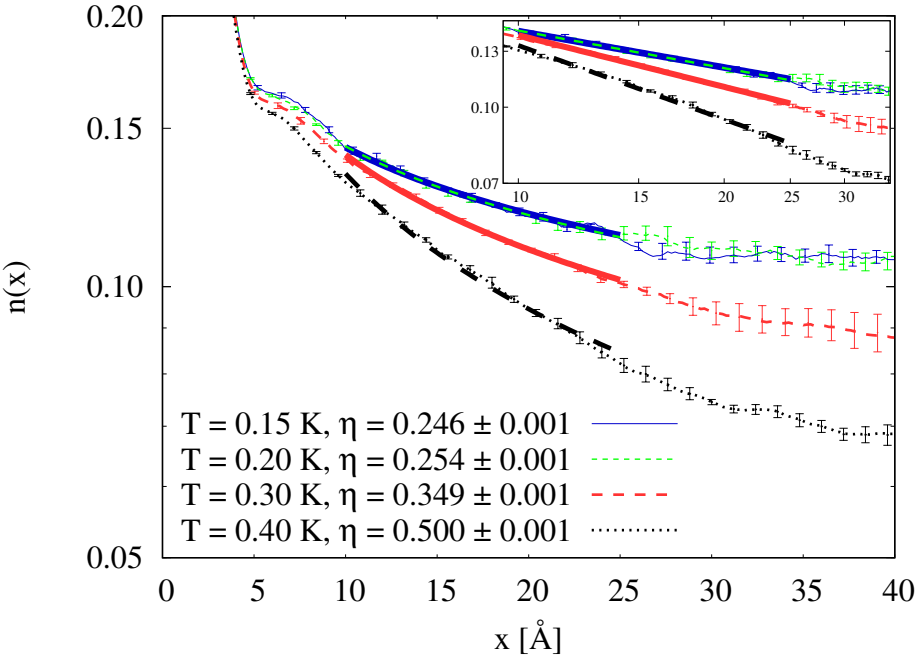
Dodatna potvrda efektivne dimenzionalnosti tekućeg helija ^{4}He radijusa $R = 4$ Å unutar nanopore može se pokazati usporedbom sa slučajem kada tekućina ima radijus $R = 3$ Å. Usporedba jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, i funkcije korelacije parova, $g(x)$, u slučaju radijusa $R = 4$ Å i $R = 3$ Å iz ref. [26] je prikazana na grafovima 4.9. U slučaju manjeg radijusa, $R = 3$ Å, pokazano je [26] da je tekućina jednodimenzionalna bez obzira na gustoću. Na grafu 4.9 uspoređeni su rezultati dviju pora s istom trodimenzionalnom gustoćom, $\rho' = \pi L(4\text{ Å})^2 = \pi L(3\text{ Å})^2 = 0.0212\text{ Å}^{-3}$. Ta je gustoća blizu ravnotežne gustoće trodimenzionalnog tekućeg helija, $\rho = 0.0218\text{ Å}^{-3}$. Na gornjem grafu 4.9 su prikazani rezultati jednočestične matrice gustoće, $n(x)$. U slučaju naše nanopore, $R = 4$ Å, $n(x)$ ima karakterističan oblik za dvodimenzionalnu tekućinu. Ima vodoravni algebarski dugodosežni rep bez oscilacija, a u slučaju jednodimenzionalne tekućine u nanopori radijusa $R = 3$ Å ima dugodosežne oscilacije i bržepadajući rep.

Slično je i s funkcijom korelacije parova, $g(x)$. U slučaju jednodimenzionalne tekućine u nanopori radijusa $R = 3$ Å, $g(x)$ ima dugodosežne oscilacije što je u skladu s predviđanjem LL teorije za jednodimenzionalne sustave. U slučaju šire pore, $g(x)$ tekućeg helija ^{4}He ima kratkodosežne oscilacije što je očekivano za dvodimenzionalni sustav. Dakle, $g(x)$ i $n(x)$ pri višim gustoćama za tekući helij ^{4}He radijusa $R = 4$ Å pokazuju dvodimenzionalna svojstva.



Graf. 4.10: Usporedba jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, tekućeg helija ^{4}He radijusa $R = 4$ Å, temperature $T = 0.3$ K pri četiri različite linijske gustoće od $\rho_0 = 0.20$ Å^{-1} do $\rho_0 = 0.40$ Å^{-1}. Rezultati su procijenjeni PIMC metodom. Visina dugodosežnog dijela repa $n(x)$ raste s povećanjem linijske gustoće. To je indikacija dvodimenzionalnog karaktera tekućine.

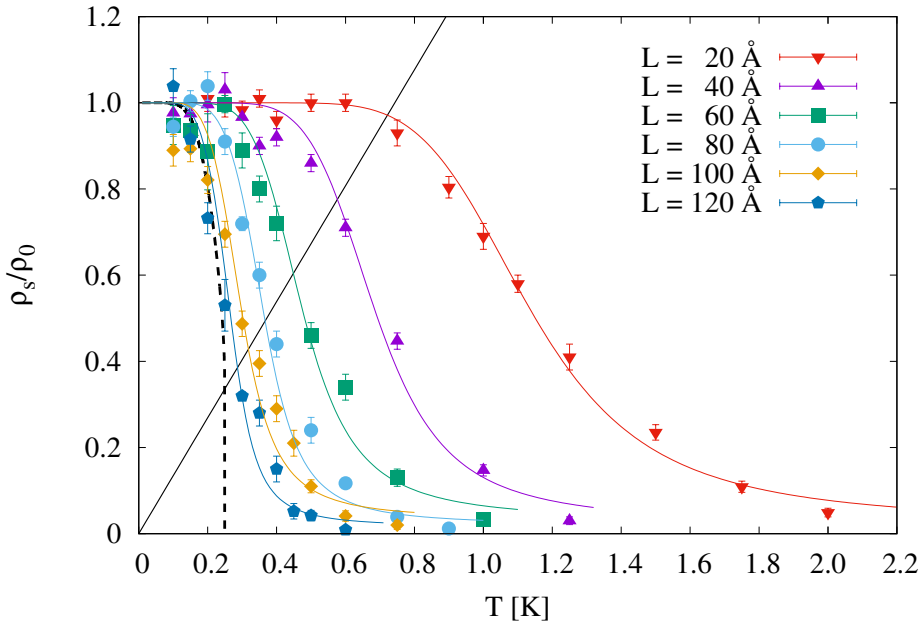
Na Grafu 4.10 su prikazani rezultati procjene jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, tekućeg helija ^{4}He radijusa $R = 4$ Å, temperature $T = 0.3$ K pri četiri različite linijske gustoće od $\rho_0 = 0.20$ Å^{-1} do $\rho_0 = 0.40$ Å^{-1}. Rezultati su procijenjeni PIMC metodom. Iz prethodnih razmatranja jednodimenzionalni karakter tekućine je očekivan za sve linijske gustoće manje od $\rho_0 \approx 0.30$ Å^{-1}. Pri niskim gustoćama, $n(x)$ ima naglije algebarsko opadanje repa što je karakteristika jednodimenzionalne tekućine. Pri višim gustoćama, $n(x)$ ima oblik karakterističan za dvodimenzionalnu tekućinu. Visina repa je viša od one u jednodimenzionalnom slučaju i rep sporije opada bez oscilacija što je karakteristika dvodimenzionalne tekućine.



Graf. 4.11: Jednočestična matrica gustoće, $n(x)$, tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å pri linijskoj gustoći $\rho_0 = 0.4$ Å^{-1}. Kako se temperatura smanjuje, rep se podiže. Izraz (1), $n(x) \sim x^{-\eta(T)}$, smo fitali na $n(x)$ na rasponu $10 \leq x \leq 25$ Å. Na tom rasponu očekujemo da $n(x)$ opada algebarski s x i to iznad suprafluidne temperature prijelaza, T_c, ali blizu T_c. Rezultati fitanja sugeriraju da je temperatura suprafluidnog prijelaza tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore linijske gustoće $\rho_0 = 0.40$ Å^{-1} $T_c \approx 0.18$ K.

Prethodno je spomenuto da u dvodimenzionalnim sustavima postoji temperatura prijelaza, T_c, pri kojoj tekućina prelazi iz normalne u suprafluidnu. Iz KT teorije, T_c se može procijeniti iz oblika jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, kao temperatura pri kojoj eksponent $\eta(T)$ iz izraza (1), koji opisuje algebarski rep od $n(x)$, dosegne vrijednost $\eta(T_c) = 0.25$. Na Grafu 4.11 su prikazani PIMC rezultati procjene jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, za različite temperature pri linijskoj gustoći $\rho_0 = 0.40$ Å^{-1}, pri kojoj tekući helij pokazuje svojstva dvodimenzionalnog sustava. Izraz (1), $n(x) \sim x^{-\eta(T)}$, smo fitali na $n(x)$ u rasponu $10 \leq x \leq 25$ Å. U tom rasponu očekujemo da $n(x)$ opada algebarski s x i to iznad suprafluidne temperature prijelaza, T_c, ali blizu T_c. Dakle, s eksponentom, $\eta(T)$, većim od 0.25. Dugodosežni dio jednočestične matrice gustoće, $n(x)$, se ne može koristiti za procjenu $\eta(T)$ fitanjem jer nije očekivano da opada algebarski, a također postoji utjecaj periodičnih rubnih uvjeta. Iz Grafa 4.11 je vidljivo da postoji konačna temperatura pri kojoj je eksponent $\eta(T) = 0.25$. Dakle, za linijsku gustoću $\rho_0 = 0.40$ Å^{-1} postoji konačna temperatura suprafluidnog prijelaza, T_c, što je očekivano za dvodimen-

zionalnu tekućinu. Možemo zaključiti da je $T_c \approx 0.15 - 0.20$ K. Dakle, jako niska, ali konačna temperatura. Za usporedbu, udio suprafluida, ρ_S/ρ_0, i jednočestična matrica gustoće, $n(x)$, pri nižim gustoćama $\rho_0 \leq 0.30$ Å^{-1}, u skladu su s jednodimenzionalnim LL teorijskim opisom.



Graf. 4.12: Rezultati PIMC procjene udjela suprafluida tekućeg helija ^{4}He unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å u ovisnosti o temperaturi za različite duljine L. Linearna gustoća tekućine je $\rho_0 = 0.4$ Å^{-1}. Linije predstavljaju fitana rješenja KT jednadžbi. Crna isprekidana linija je rješenje KT jednadžbi za beskonačno dugu nanoporu. Suprafluidna temperatura prijelaza, $T_c = 0.245 \pm 0.005$ K, se određuje kao temperatura pri kojoj se puna linija (115) i isprekidana linija sijeku. Procjena temperature prijelaza odgovara procjeni iz jednočestične matrice gustoće.

Temperatura suprafluidnog prijelaza može se procijeniti i iz ovisnosti udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, o temperaturi koristeći metodu skliranja. Ceperley i Pollock [112] su u svom radu koristili Kosterlitz-Thouless rekurzijske relacije

$$\frac{dK^{-1}(l)}{dl} = 4\pi^3 y^2(l), \tag{112}$$

$$\frac{dy(l)}{dl} = [2 - \pi K(l)]y(l), \tag{113}$$

gdje je

$$K(l) = \hbar^2 \rho_S(l)/mkT, \tag{114}$$

a $y(l)$ je pomoćna funkcija i nema fizikalno značenje.

Iz Kosterlitz-Thouless rekurzijskih relacija može se procijeniti udio suprafluida beskonačno velikog dvodimenzionalnog filma fitanjem na rezultate PIMC proračuna za konačne veličine sustava. Suprafluidna temperatura prijelaza odgovara temperaturi pri kojoj se $\rho_S/\rho_0(T)$, procijenjen iz KT relacija, siječe s relacijom [112]

$$\frac{\rho_S(T_c)}{\rho_0} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{k_B T_c}{\pi\rho}, \tag{115}$$

gdje je ρ dvodimenzionalna gustoća tekućine. Udio suprafluida procijenjen iz KT relacija ima skok pri T_c od nule do neke konačne vrijednosti nakon koje nastavi glatki rast snižavanjem temperature. Takva ovisnost je karakteristična za dvodimenzionalne sustave i KT opis odgovara tome.

Kosterlitz-Thouless relacije (112) i (113) su originalno izvedene za opis dvodimenzionalnih sustava kvadratnog oblika, $L \times L$, površine L^2. ρ_S/ρ_0 se procjenjuje tako što se KT jednadžbe integriraju po varijabli l od 0 do $l \equiv \ln(r/d) = \ln(L/2d)$ uz početne uvjete

$$K(l=0) = \frac{\hbar^2\rho}{mkT} \tag{116}$$

$$y(l=0) = \mathrm{e}^{-\beta E_c}. \tag{117}$$

Plošnu gustoću, ρ, smo izračunali kao

$$\rho = \frac{\rho_0}{2\pi r}, \tag{118}$$

gdje je $\rho_0 = 0.4$ Å^{-1} linijska gustoća, a r radijus cilindra. No problem je koju vrijednost uzeti za radijus. Ako se vratimo na grafove 4.2 i 4.4, možemo uočiti da se helij ne distribuira u infinitezimalno tanki plašt cilindra nego je raspodijeljen u cilindar konačne širine. Intuitivno i racionalno opravdano bi bilo uzeti srednju udaljenost helija od centra

$$r = \langle r_\perp \rangle \pm \sqrt{\langle r_\perp^2 \rangle - \langle r_\perp \rangle^2} = 1.747 \pm 0.45 \text{ Å}. \tag{119}$$

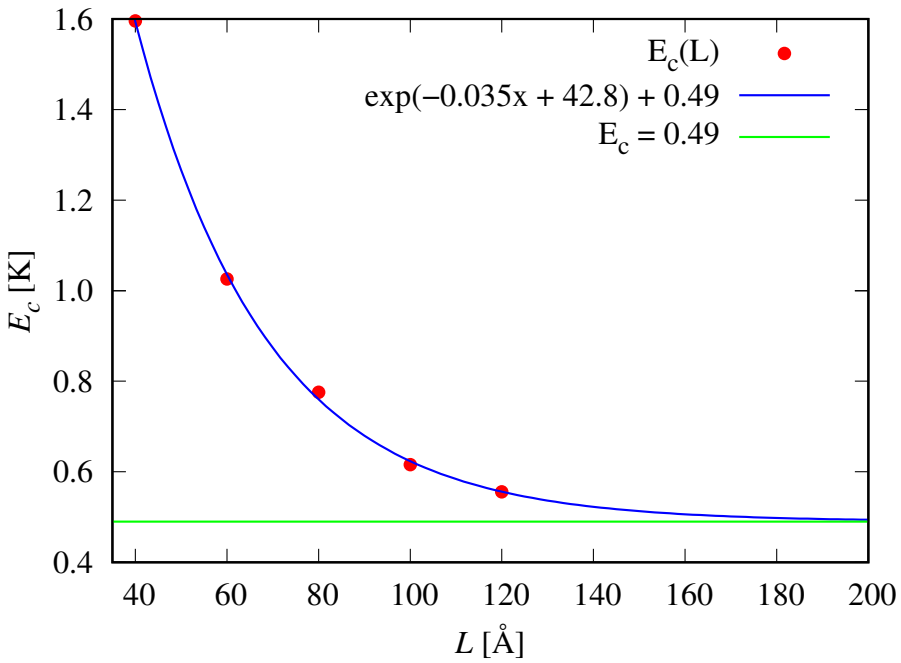
Jasno je da je ovakva procjena aproksimativna i da cilindrična geometrija inducira dodatne efekte.

Uzimajući (119) za r, plošna gustoća helija na cilindru je

$$\rho = \frac{\rho_0}{2\pi r} = 0.039 \pm 0.01 \ \text{Å}^{-2}. \tag{120}$$

Nadalje, KT jednadžbe (112) i (113) rješavamo numerički Eulerovom metodom. Parametre d i E_c prilagođavamo tako da izračunati $\rho_S(l,T)/\rho_0$ najbolje opisuje PIMC rezultate, tj. da je suma kvadrata udaljenosti od PIMC rezultata minimalna. Rezultati opisa udjela suprafluida u ovisnosti o temperaturi izračunatog iz KT jednadžbu i PIMC rezultati za različite duljine nanopore su prikazani na Grafu 4.12 obojenim linijama. Optimalni parametri fitanja, l i E_c, ovise o duljini nanopore, L. Za procjenu suprafluidne temperature prijelaza, T_c, potreban nam je KT opis suprafluidnosti kada $L \to \infty$, tako da E_c ne možemo procijeniti direktnim fitanjem jer nemamo PIMC rezultate za $L \to \infty$.

Srećom, optimalni E_c za slučaj kada je duljina nanopore beskonačna možemo procijeniti ekstrapolacijom. Na Grafu 4.13 je prikazana ovisnost optimalnog E_c parametra o duljini L i fitana eksponencijalna funkcija koja je opisuje. Fitana eksponencijalna funkcija ima asimptotu na $E_c = 0.49$ K pa zaključujemo da je $E_c(L \to \infty) = 0.49$ K. Kada uzmemo u obzir neodređenost koja proizlazi iz neodređenosti plošne gustoće, slijedi da je $E_c(L \to \infty) = 0.49 \pm 0.015$ K. To smo procijenili ponavljanjem postupka ekstrapolacije uvrštavajući dva ruba neodređenosti plošne gustoće, $\rho = 0.029 - 0.049$ Å^{-2}, u početni uvjet za $K(l=0) = \hbar^2\rho/mkT$.



Graf. 4.13: Ovisnost optimalnog E_c parametra o duljini L i fitana eksponencijalna funkcija koja je opisuje. Fitana eksponencijalna funkcija ima asimptotu na $E_c = 0.49$ K pa zaključujemo da je $E_c(L \to \infty) = 0.49$ K.

Koristeći $l \to \infty$ Å $(L \to \infty)$ i $E_c(L \to \infty) = 0.49 \pm 0.015$ K iz KT jednadžbi konstruiramo temperaturnu ovisnost udjela suprafluida za beskonačnu duljinu. Dobivena krivulja je prikazana isprekidanom linijom na Grafu 4.12, a relacija (115) se siječe sa $\rho_S(T)/\rho_0$ točno na T_c pri kojoj udio suprafluida ima skok. Procijenjena temperatura prijelaza je $T_c = 0.245 \pm 0.005$ K. Podsjetimo se da neodređenost procjene T_c proizlazi iz neodređenosti procjene plošne gustoće na cilindru. Zanimljivo je da velika neodređenost radijusa cilindra, tj. plošne gustoće, ima jako mali utjecaj na neodređenost procjene suprafluidne temperature prijelaza, T_c. Predviđanje suprafluidne temperature prijelaza iz KT jednadžbi ugrubo odgovara predviđanjima iz analize jednočestične matrice gustoće.

U prijašnjim PIMC istraživanjima [25] u kojima je proučavan helij ^{4}He u širim porama dobivena je veća temperatura prijelaza od vrijednosti koje su u ovom radu procijenjene za poru radijusa $R = 4$ Å, što je u skladu s ranije uočenim smanjenjem temperature prijelaza sa smanjenjem radijusa nanopore: $T_c = 1.43$ K za $R = 9$ Å, odnosno $T_c = 1.21$ K za $R = 7.3$ Å i $T_c \approx 0.3 - 0.7$ K za $R = 6$ Å. U eksperimentima Wada *et al.* [115] i Taniguchi *et al.* [116] uočeno je $T_c = 1$ K i $T_c = 0.9$ K za poru radijusa $R = 9$ Å$(d = 28$ Å).

5 DVOKOMPONENTNE BOZONSKE MJEŠAVINE U HARMONIČKOJ ZAMCI

U ovom poglavlju su predstavljeni rezultati trodimenzionalne bozonske mješavine dviju vrsta bozona zarobljenih u harmoničkoj zamci koje smo proučili kvantnim Monte Carlo simulacijama. Proračunali smo svojstva sustava pri apsolutnoj nuli i pri konačnim temperaturama. Predstavljena su previđanja temperaturne ovisnosti udjela suprafluida pojedine komponente i Bose-Einstenovog kondenzata. Profili gustoća su uspoređeni s teorijskim Gross-Pitaevskii opisom.

5.1 Model i metoda

Proučili smo ravnotežni sustav bozonske mješavine dvije vrste: b_1 i b_2 iste mase, $m_1 = m_2 = m$, i istog broja atoma, $N_1 = N_2 = N = 50$. Sustav je opisan hamiltonijanom

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{i=1}^{2N} \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{2N} \frac{m\omega^2 r_i^2}{2} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} u_{11}\left(\frac{r_{0_{11}}}{r}\right)^{10} \\ &+ \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} u_{22}\left(\frac{r_{0_{22}}}{r}\right)^{10} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N} u_{12}\left(\frac{r_{0_{12}}}{r}\right)^{10}. \end{aligned} \tag{121}$$

Parametri potencijala interakcija u_{ij} i $r_{o_{ij}}$ se biraju ovisno o željenoj duljini raspršenja, a_{ij}. Naprimjer, prvo postavimo $r_{0_{ij}} = 1.5a_{ij}$, gdje je a_{ij} duljina raspršenja interakcije između i i j vrste, te numerički riješimo dvočestičnu Schrödingerovu jednadžbu kako bismo odredili u_{ij} [117]. Sustav od $N = 50$ atoma se u prijašnjem istraživanju [64] pokazao da je u univerzalnom režimu. To je režim u kojem rezultati ne ovise o detaljima interakcija nego samo o duljini raspršenja.

DMC-om su proračunata svojstva sustava pri apsolutnoj nuli. Probna valna funkcija je konstruirana na uobičajen način u obliku

$$\Psi(\mathbf{R}) = \prod_{1=i<j}^{N_1} f^{(1,1)}(r_{ij}) \prod_{1=i<j}^{N_2} f^{(2,2)}(r_{ij}) \prod_{i,j=1}^{N_1,N_2} f^{(1,2)}(r_{ij}) \prod_{i=1}^{N_1} h^{(1)}(r) \prod_{i=1}^{N_2} h^{(2)}(r), \tag{122}$$

gdje je $\mathbf{R} = \{\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N\}$, $h^{(i)}$ je jednočestični član zbog vanjskog harmoničkog potencijala, a $f^{(i,j)}$ je dvočestični Jastrowljev faktor kojim se uzimaju u obzir dvočestične korelacije. $f^{(i,j)}$ je

odabran tako da odgovara rješenju dvočestičnog problema za dani potencijal i $h^{(i)} = \exp(-r^2/(2\alpha_i^2)), i = 1,2$, gdje je α_i varijacijski parametar optimiziran minimizacijom energije pomoću VMC-a. Optimalne vrijednosti α_i ovise o potencijalu interakcije. Za sve slučajeve koje smo promatrali, uočeno je da su vrijednosti α_i jako blizu vrijednosti a_{ho}, duljini raspršenja harmoničkog potencijala. Prije konačnih proračuna, DMC metoda je detaljno analizirana po broju šetača i vremenskom koraku kako je opisano u prethodnim poglavljima. Optimalni broj šetača je oko 300, a vremenski korak oko $10^{-3} m a_{11}^2/\hbar^2$ za sve režime.

Rezultate smo usporedili sa Gross-Pitaevskii jednadžbama za kvantne mješavine [65]

$$i\hbar\frac{\partial\phi_1(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}^{(1)}(\mathbf{r}) + g_{11}|\phi_1(\mathbf{r},t)|^2 + g_{12}|\phi_2(\mathbf{r},t)|^2\right)\phi_1(\mathbf{r},t), \tag{123}$$

$$i\hbar\frac{\partial\phi_2(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}^{(2)}(\mathbf{r}) + g_{22}|\phi_2(\mathbf{r},t)|^2 + g_{12}|\phi_1(\mathbf{r},t)|^2\right)\phi_2(\mathbf{r},t), \tag{124}$$

gdje je

$$g_{ij} = \frac{2\pi\hbar^2 a_{ij}}{\mu} = 2\pi\hbar^2 a_{ij}\left(m_i^{-1} + m_j^{-1}\right) \tag{125}$$

parametar koji opisuje jakost interakcije.

Svojstva sustava na konačnim temperaturama određena su PIMC-om. Detalji PIMC proračuna su predstavljeni u podpoglavlju 5.2.1.

5.2 Rezultati

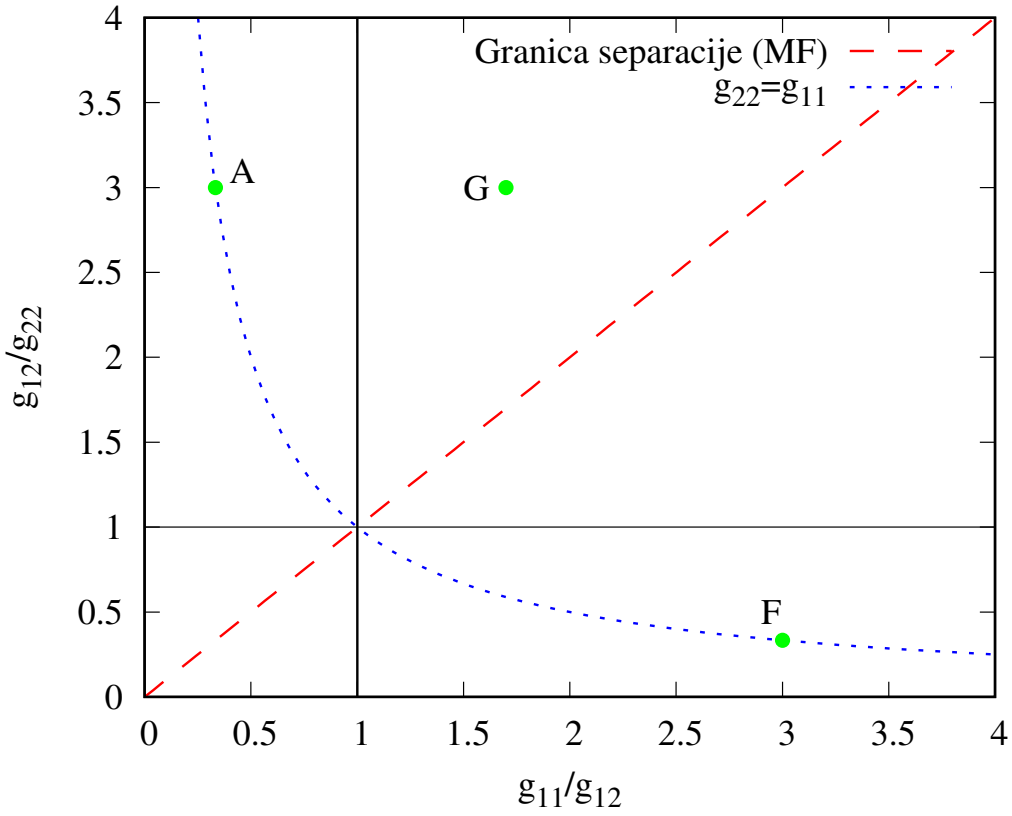
Na Grafu 5.1 je prikazan fazni dijagram separacije bozonske mješavine razapet $g_{12}/g_{22} - g_{11}/g_{12}$ osima. Graf je rekonstruiran iz rezultata objavljenih u ref. [64]. Crvena isprekidana linija predstavlja predviđenu granicu separacije pomoću teorije srednjeg polja. Za sve točke ispod pravca, sustav je u miješanom režimu, a iznad u separiranom. Plava isprekidana linije predstavlja sve točke faznog dijagrama za koje vrijedi da su međuatomske interakcije unutar iste vrste jednake jakosti, $g_{11} = g_{22}$. Fazni dijagram bozonskih mješavina je bogat efektima, ali ga je vremenski prezahtjevno cijeloga proučiti kvantnim Monte Carlo simulacijama. Zbog toga, smo odabrali tri karakteristične točke koje su, između ostalih, proučene u ref. [64] pri

apsolutnoj nuli. Označene točke na Grafu 5.1 predstavljaju koordinate faznog dijagrama koje smo proučili u ovom radu:

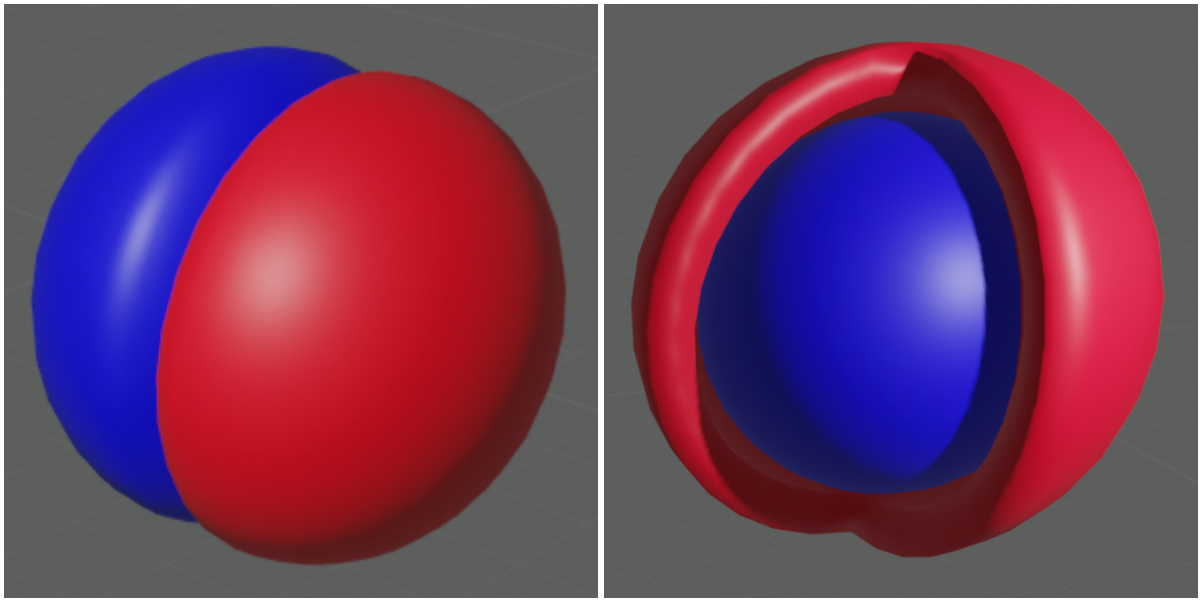
- Točka F - ($g_{12}/g_{22} = 0.33$, $g_{11}/g_{12} = 3$) sustav je u miješanom režimu. Obje vrste imaju jednake prostorne raspodjele koje se preklapaju.

- Točka A - ($g_{12}/g_{22} = 3$, $g_{11}/g_{12} = 0.33$) sustav je u separiranom režimu. Vrste se bozona prostorno separiraju u dvije nakupine kako je pojednostavljeno prikazano na Slici 5.1. Interakcije između atoma iste vrste su jednake kao i u miješanom slučaju, samo je veća interakcija između različitih vrsta. Pojednostavljen prikaz ovog režima je prikazana na Slici 5.1 lijevo.

- Točka G - ($g_{12}/g_{22} = 3$, $g_{11}/g_{12} = 1.7$) sustav je u separiranom režimu. Jedna se vrsta raspodijeli u kuglu, a druga vrsta je istisnuta izvan u obliku ljuske oko prve vrste. Ilustracija ovog režima je prikazana na Slici 5.1 desno.



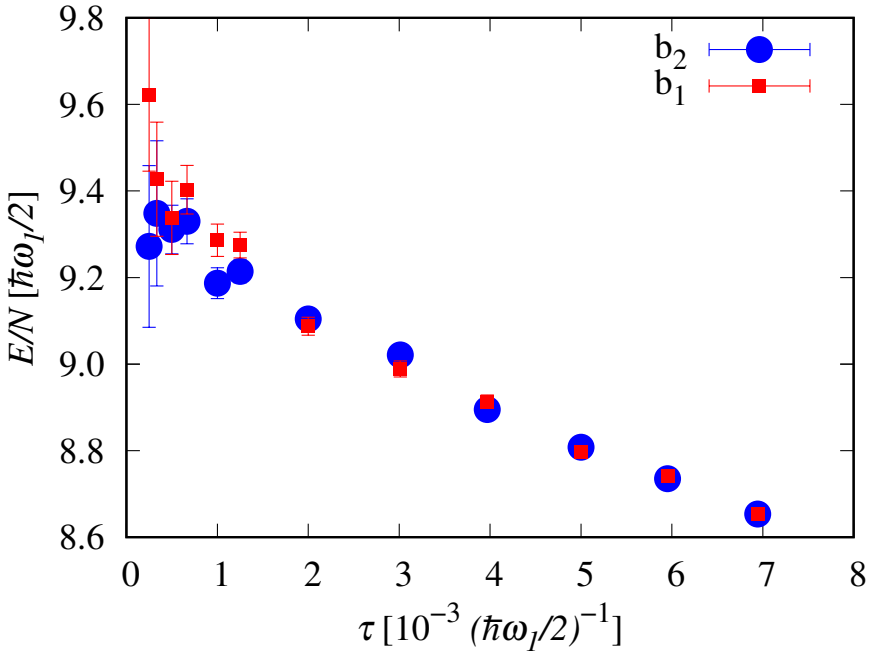
Graf. 5.1: Fazni dijagram separacije. Po teoriji srednjeg polja sve točke ispod crvenog isprekidanog pravca odgovaraju miješanom režimu, a iznad separiranom. Fazni dijagram je konstruiran po rezultatima iz rada [64]. F, G i A su točke faznog dijagrama koje smo proučili u ovom radu, a DMC-om su proučene i u ref. [64].



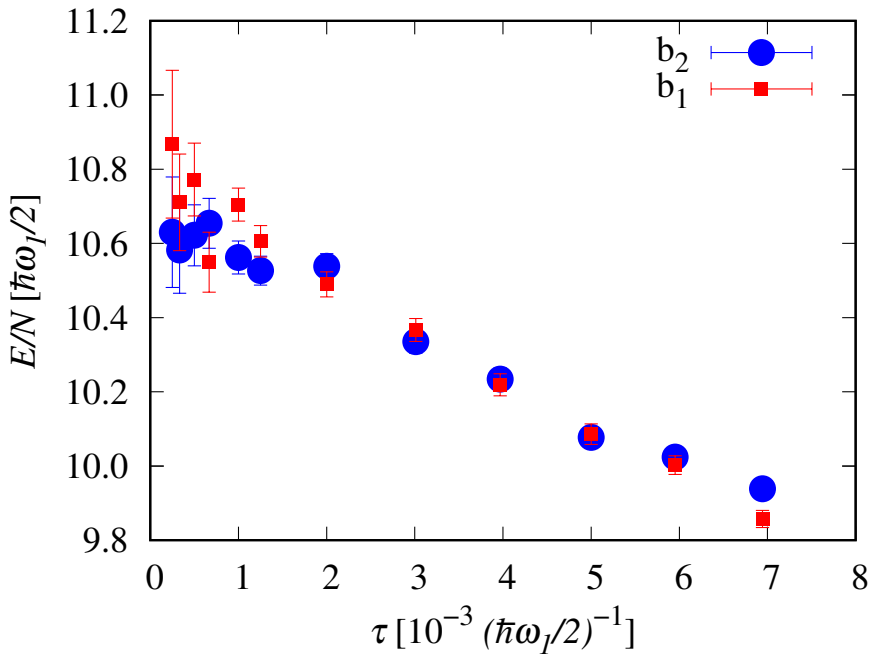
Slika. 5.1: Ilustracija separiranih režima. Točka A na dijagramu 5.1 - vrste bozona se prostorno separiraju u dvije nakupine u obliku polukugli s uglađenim rubovima koje se dodiruju s plohama (lijevo) i točka G na dijagramu 5.1 - jedna vrsta raspodijeli se u kuglu, a druga vrsta je istisnuta izvan u obliku ljuske oko prve vrste (desno).

5.2.1 PIMC Analiza vremenskog koraka

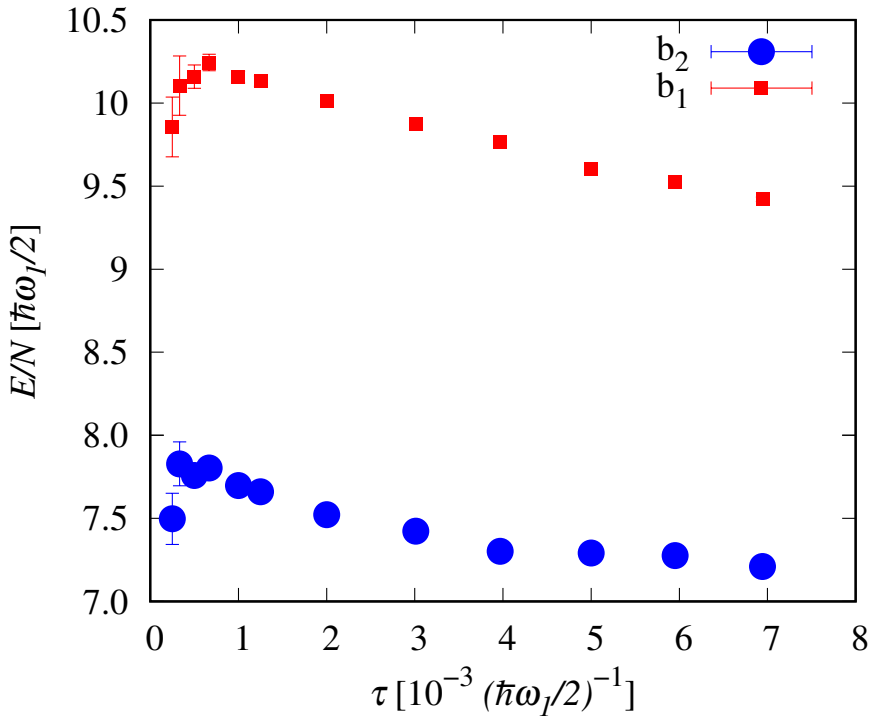
Analizirali smo ovisnost ukupne energije po atomu svake od dvije komponente, E_{B_1} i E_{B_2}, o koraku u imaginarnom vremenu, τ. Važnost ove analize je detaljnije objašnjena u poglavlju 3.3. Općenito je očekivano da će optimalni vremenski korak biti sličan za sve točke jer je priroda sustava slična u smislu veličine, vanjskog potencijala i interakcija. Rezultati su prikazani na Grafu 5.2 za točku F, na Grafu 5.3 za točku A i na Grafu 5.4 za točku G. Optimalni vremenski korak, τ, za sve točke je oko $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$. Energija po atomu u svim slučajevima raste smanjenjem koraka sve do oko $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$ nakon čega nastaje šum. Optimalno je odabrati $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$ jer je procjena energije pri tom koraku unutar neodređenosti procjene za sve manje korake. Ovisnost energije je ista za obje komponente u svim slučajevima, osim u slučaju točke F u kojoj prostorna raspodjela nije simetrična. Za dobro odabrane parametre simulacije očekujemo slaganje PIMC rezultata na niskim temperaturama s DMC rezultatima.



Graf. 5.2: Analiza ovisnosti ukupne energije po atomu u ovisnosti o vremenskom koraku PIMC-a, τ za točku F. Očekivano, ovisnost energije je jednaka za obje komponente i raste smanjenjem koraka sve do oko $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$ nakon čega nastaje šum. Optimalno je odabrati $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$.



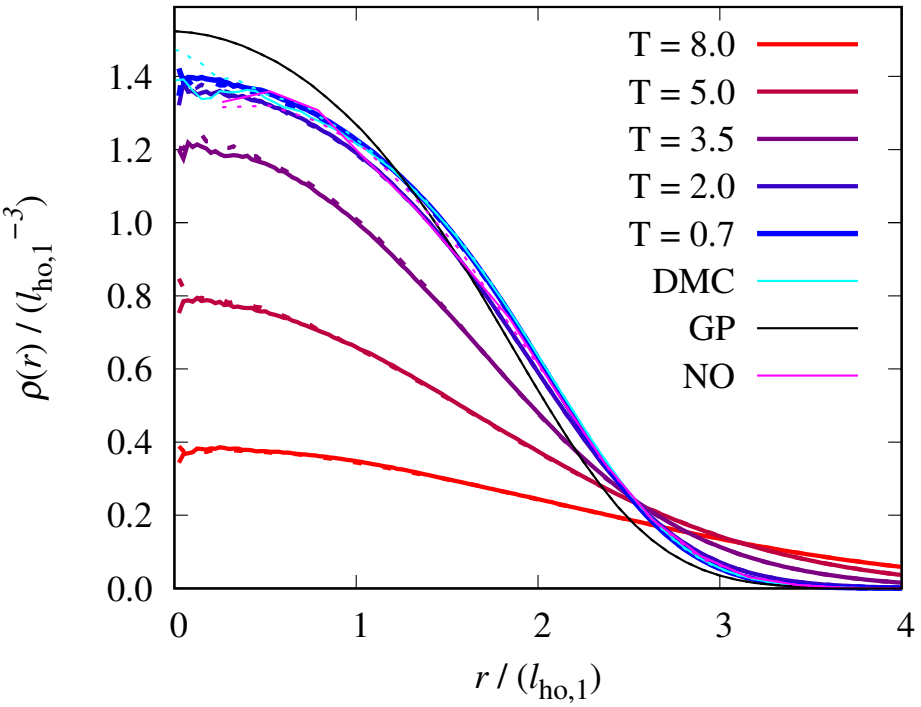
Graf. 5.3: Analiza ovisnosti ukupne energije po atomu u ovisnosti o vremenskom koraku PIMC-a, τ za točku A. Očekivano, ovisnost energije je jednaka za obje komponente i raste smanjenjem koraka sve do oko $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$ nakon čega nastaje šum. Optimalno je odabrati $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$.



Graf. 5.4: Analiza ovisnosti ukupne energije po atomu u ovisnosti o vremenskom koraku PIMC-a, τ za točku G. Energija je različita za dvije komponente. To je i očekivano s obzirom na očekivani režim separacije u obliku ljuske (Graf 5.1 (desno)). Energija raste smanjenjem koraka sve do oko $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$ nakon čega nastaje šum. Optimalno je odabrati $\tau = 0.001\ (0.5\hbar\omega)^{-1}$.

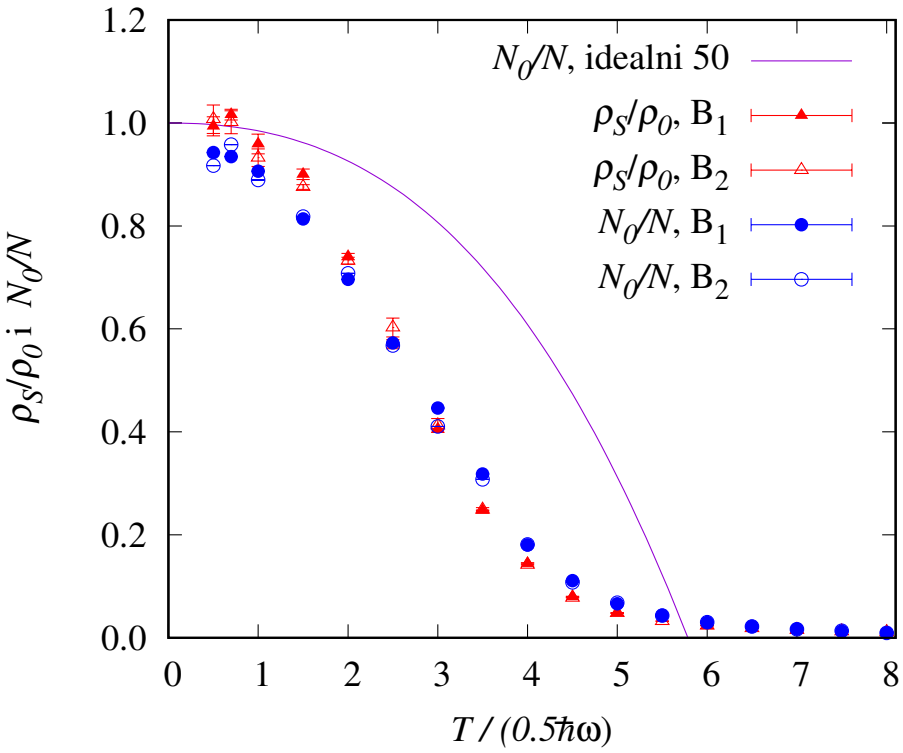
5.2.2 Miješani režim

Rezultati procjene profila gustoće za obje komponente, B_1 i B_2, pri apsolutnoj nuli i konačnim temperaturama su prikazani na Grafu 5.5. Rezultati su uspoređeni s teorijskim Gross-Pitaevskii predviđanjem. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Rezultati se za obje komponente poklapaju unutar neodređenosti za obje metode: DMC i PIMC za najniže temperature. PIMC profili skupljaju se prema sredini snižavanjem temperature te se poklapaju za sve temperature niže od $T = 0.7\ \hbar\omega/2$. DMC se rezultati procjene za apsolutnu nulu poklapaju s PIMC rezultatima za temperature niže od $T = 0.7\ \hbar\omega/2$. Gross-Pitaevskii predviđa uže profile u odnosu na egzaktne DMC i PIMC metode što je opaženo i u ranijim istraživanjima [64]. Zelenom linijom je prikazano PIMC predviđanje profila prirodne orbitale pri $T = 0.7\ \hbar\omega/2$ i poklapa se s DMC i PIMC profilima gustoće.



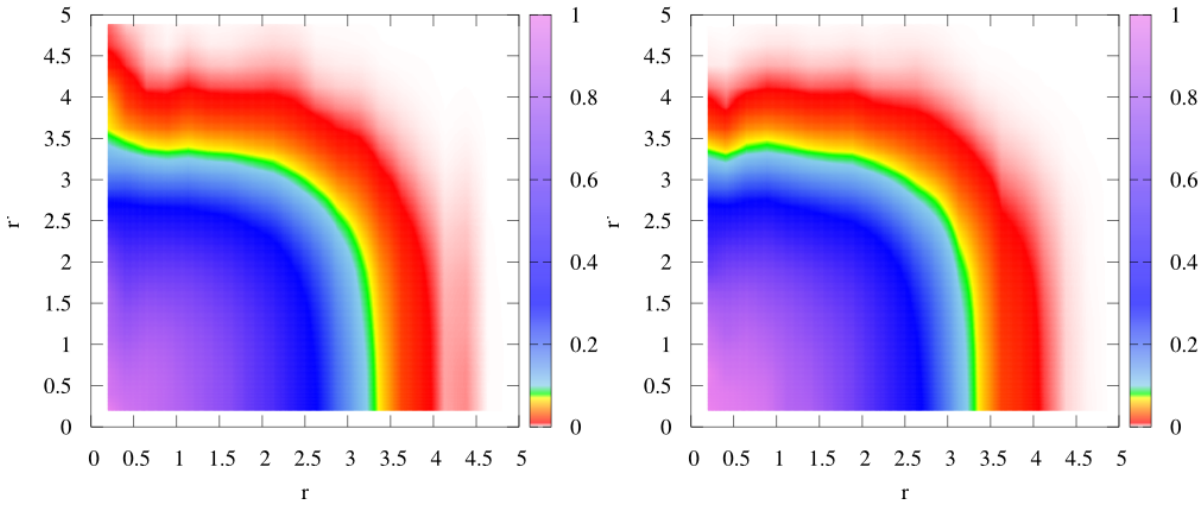
Graf. 5.5: Profili gustoće za B_1 (isprekidane linije) i B_2 (pune linije) procijenjeni iz minimuma vanjskog harmoničkog potencijala u miješanom režimu. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. PIMC rezultati pri niskim temperaturama poklapaju se s DMC rezultatima. GP predviđa uže profile. Profili prirodnih orbitala (NO) su prikazani zelenom linijom.

Na Grafu 5.6 su prikazani PIMC rezultati procjene udjela suprafluida, ρ_S/ρ, i Bose-Einstenovog kondenzata, N_0/N, za obje komponente u ovisnosti o temperaturi u miješanom režimu. Pri niskim temperaturama, udio suprafluida je 1.0 dok je udio Bose-Einstenovog kondenzata malo niži zbog interakcija. Smanjenjem temperature, svi udjeli padaju, ali zanimljivo je da oko $T = 3\ \hbar\omega/2$ udio kondenzata postaje veći od udjela suprafluida. Neobična pojava u kojoj je N_0/N veći od ρ_S/ρ je predviđena u ref. [118] u kojem se za razliku od ovog rada sustav nalazi u vanjskom potencijalu s neredom.

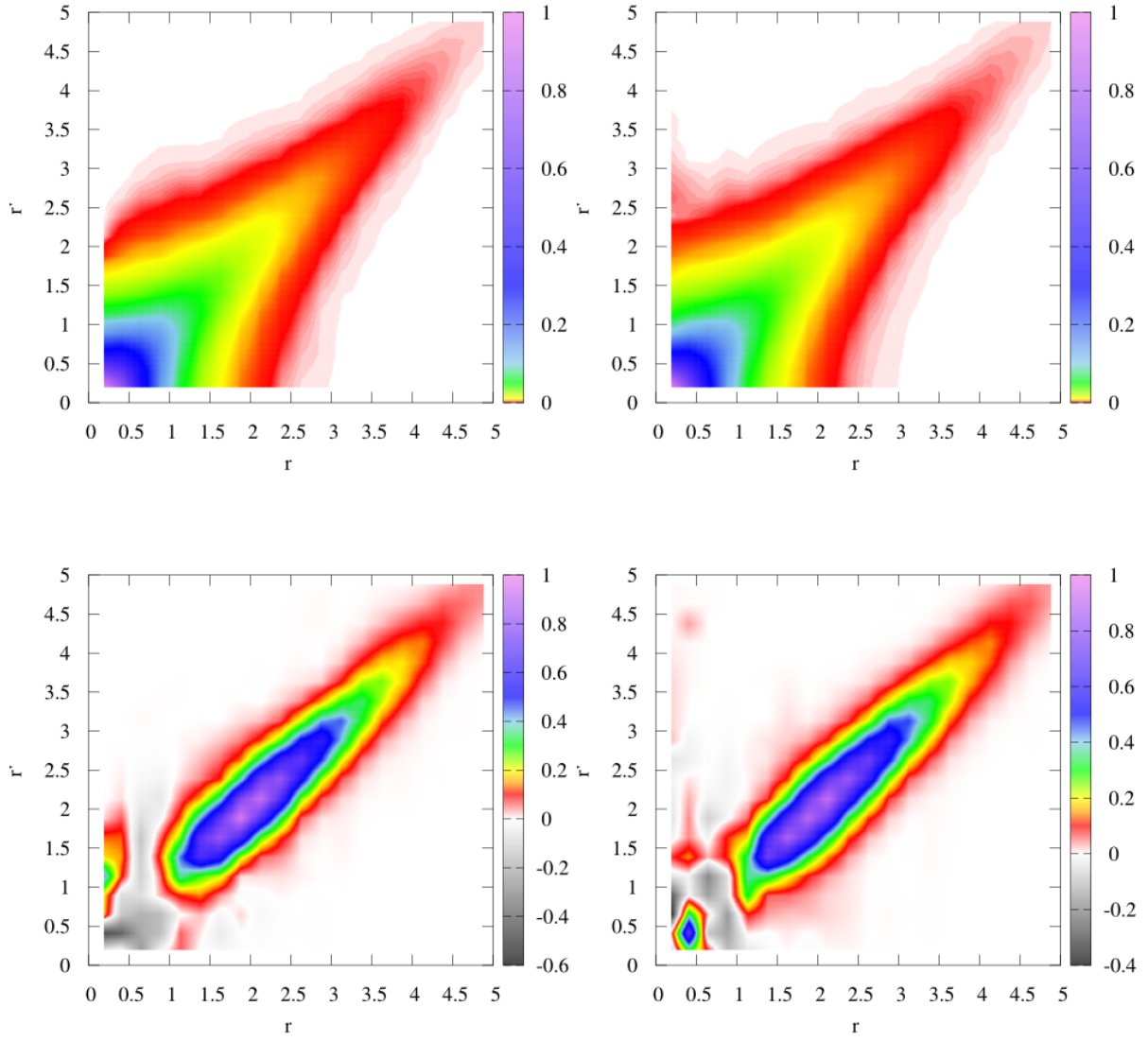


Graf. 5.6: Temperaturna ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za B_1 i B_2 u miješanom režimu. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Rezultati su uspoređeni s teorijskim predviđanjem udjela Bose-Einsteinovog kondenzata za 50 neinteragirajućih atoma u harmoničkoj zamci iz [100]. Zanimljivo je da oko $T = 3\,\hbar\omega/2$ udio Bose-Einstenovog kondenzata postaje veći od udjela suprafluida.

Na grafovima 5.7 i 5.8 su prikazane neke komponente jednočestične matrice gustoće, $\rho_l(r,r')$ za dvije temperature, $T = 0.7\,\hbar\omega/2$ (Graf 5.7) i $T = 8.0\,\hbar\omega/2$ (Graf 5.8).



Graf. 5.7: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 0.7\,\hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.

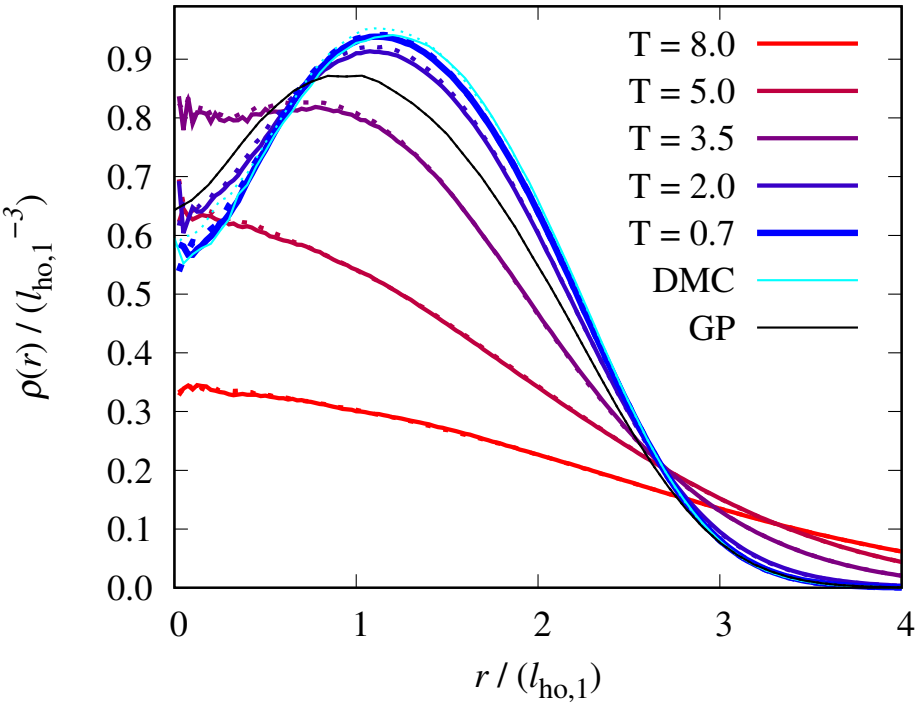


Graf. 5.8: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ (gore) i $\rho_9(r,r')$ (dolje) jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 8.0\ \hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.

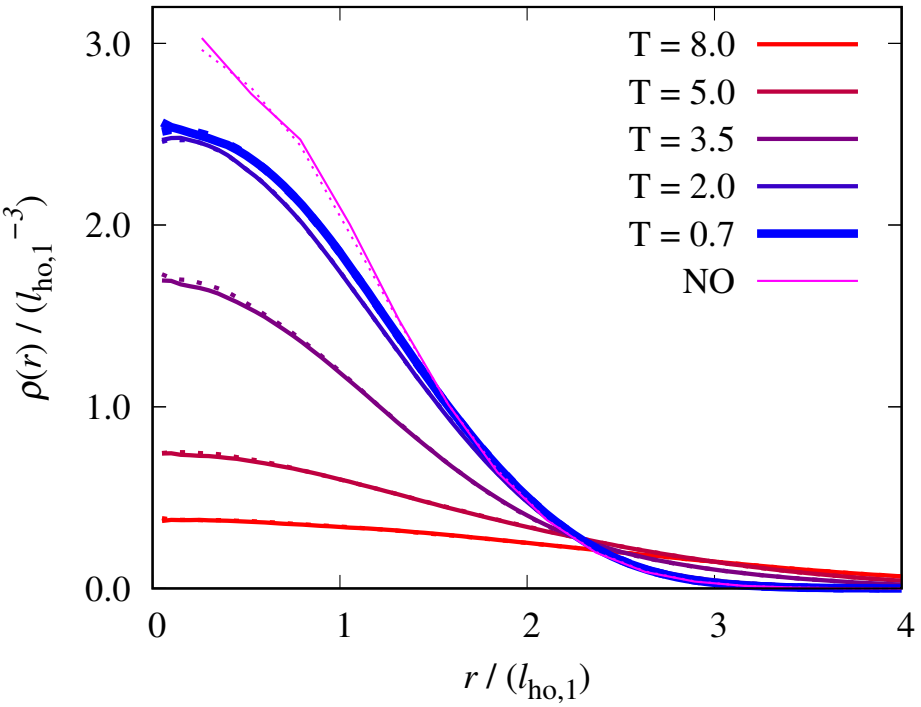
5.2.3 Separirani režim: dvije nakupine

Rezultati procjene profila gustoće za obje komponente, B_1 i B_2, pri apsolutnoj nuli i konačnim temperaturama su prikazani na grafovima 5.9 i 5.10. Profili gustoće procijenjeni iz minimuma harmoničke zamke su uspoređeni s teorijskim Gross-Pitaevskii predviđanjem (Graf 5.9). Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Rezultati se za obje komponente poklapaju unutar neodređenosti za obje metode: DMC pri $T = 0\ \hbar\omega/2$ i PIMC pri temperaturama $T = 0.5\ \hbar\omega/2$ i $T = 0.7\ \hbar\omega/2$. Povećanjem temperature komponente se prostorno izmiješaju. Gross-Pitaevskii predviđa uže profile u odnosu na egzaktne DMC i PIMC metode.

Na Grafu 5.10 su prikazani profili gustoće procijenjeni PIMC metodom iz centra mase svake komponente kako bismo usporedili profile s profilima prirodnih orbitala. Repovi se profila pri niskim temperaturama i repovi prirodnih orbitala dijelomično poklapaju. U odnosu na ostala dva režima, u ovom se slučaju najlošije poklapaju. Odstupanje profila gustoće od profila prirodne orbitale je očekivan ako uočimo da je maksimalni udio kondnezata između 80 % i 85 % (Graf 5.11).

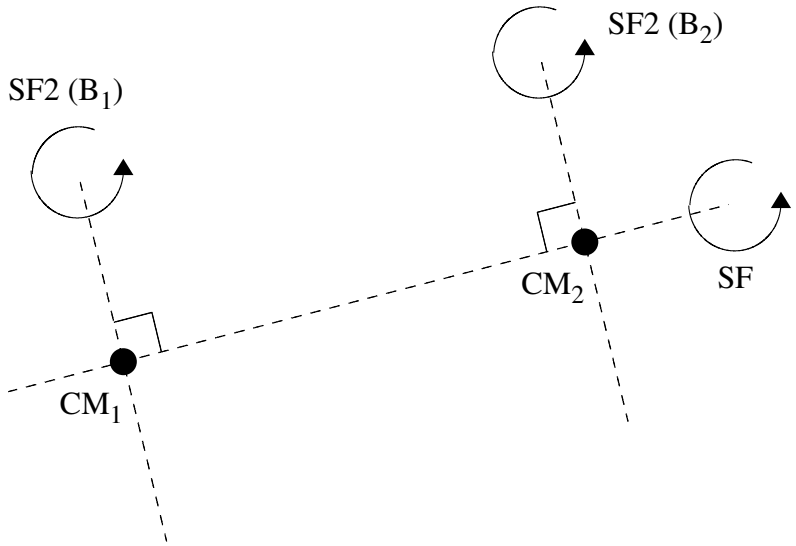


Graf. 5.9: Profili gustoće za B_1 (isprekidane linije) i B_2 (pune linije) procijenjeni iz minimuma vanjskog harmoničkog potencijala u separiranom režimu s dvije nakupine. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. PIMC rezultati pri niskim temperaturama poklapaju se s DMC rezultatima. GP predviđa uže profile.



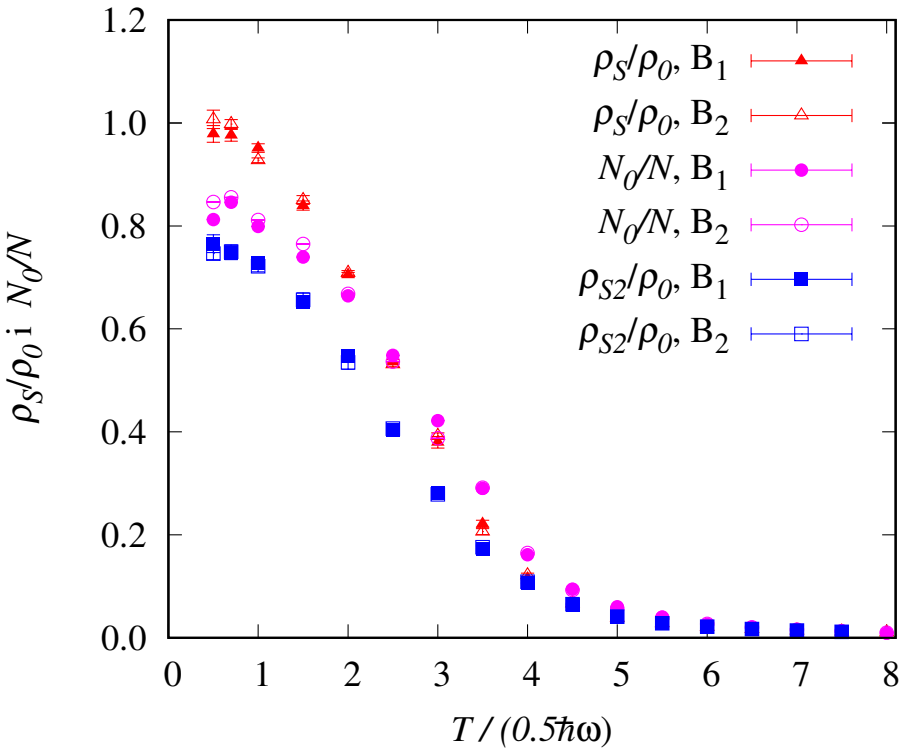
Graf. 5.10: Profili gustoće za B_1 (isprekidane linije) i B_2 (pune linije) procijenjeni iz centra mase svake komponente u separiranom režimu s dvije nakupine. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Prirodne orbitale (NO) su prikazane zelenim linijama.

Režim s dvije nakupine je jedini od tri režima u kojem se centri mase komponenti B_1 i B_2 ne poklapaju što može se zaključiti i iz Ilustracije 5.1 (lijevo). Zbog toga smo modificirali kod tako da estimatorom površine procijenjuje udio suprafluida pojedine komponente u odnosu na dvije različite osi. Osi su skicirane na Ilustraciji 5.2. Prva os oko koje smo procijenili udio suprafluida obje komponente, SF, je os koja je određena centrima mase, a druga, SF2, je proizvoljna os koja prolazi kroz odgovarajući centar mase i okomita je na prvu.



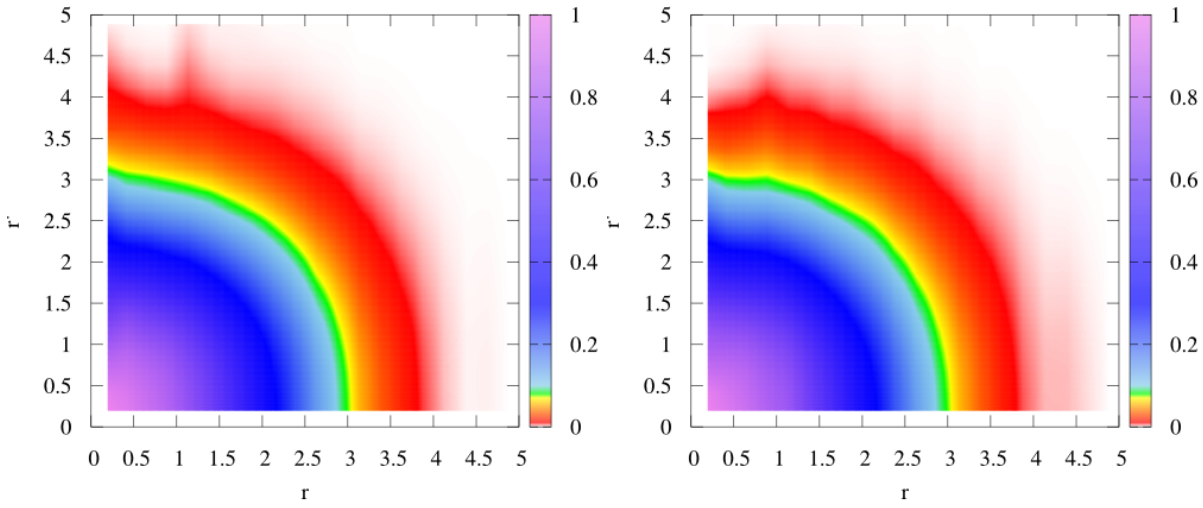
Slika. 5.2: Skica tri osi oko kojih se računa udio suprafluida SF1 i SF2 za obje komponente. Prva os oko koje smo procijenili udio suprafluida, SF, obje komponente je os koja je određena centrima mase, a druga, SF2, je proizvoljna os koja koja prolazi kroz odgovarajući centar mase i okomita je na prvu.

Rezultati procjene udjela suprafluida u odnosu na dvije osi i udjela Bose-Einsteinovog kondenzata su prikazani na Grafu 5.11. Udio suprafluida oko glavne, SF, osi koja prolazi kroz oba centra mase pri niskim temperaturama ide u 1 za obje komponente, a SF2 je manji, oko 0.8. I u ovom režimu postoji zanimljiv efekt u kojem udio Bose-Einsten kondenzata pada od 0.85 za $T = 0.5\ \hbar\omega/2$ do $T \approx 3\ \hbar\omega/2$ gdje postaje veći od udjela suprafluida, a onda iščezava oko $T \approx 6\ \hbar\omega/2$.

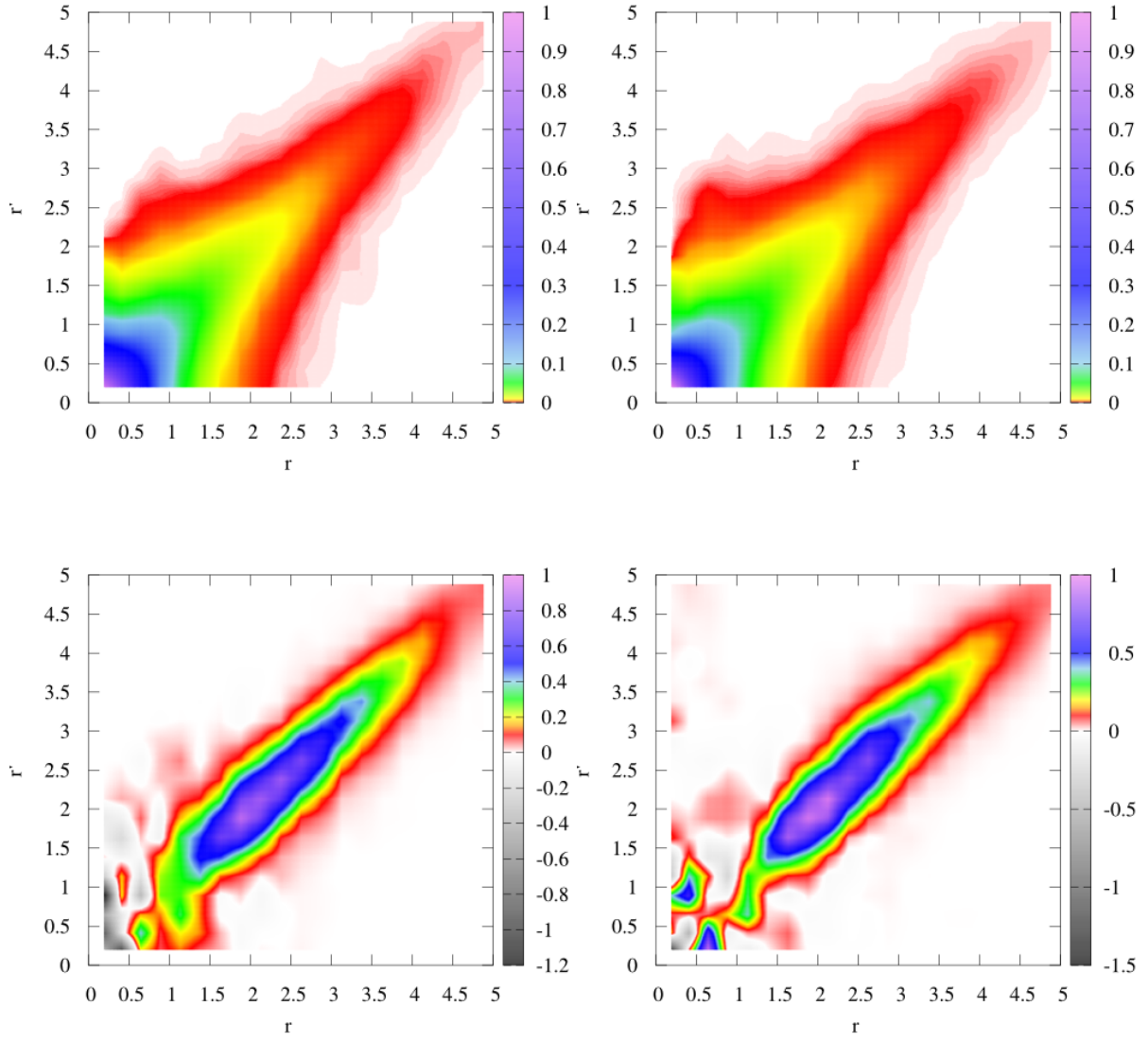


Graf. 5.11: Temperaturna ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za B_1 i B_2 u separiranom režimu s dvije nakupine. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Zanimljivo je da oko $T = 3\ \hbar\omega/2$ udio Bose-Einstenovog kondenzata postaje veći od udjela suprafluida. Također, uočavamo anizotropnost udjela suprafluida.

Na grafovima 5.12 i 5.13 su prikazane neke komponente jednočestične matrice gustoće, $\rho_l(r, r')$ za dvije temperature, $T = 0.7\ \hbar\omega/2$ (Graf 5.12) i $T = 8.0\ \hbar\omega/2$ (Graf 5.13).



Graf. 5.12: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 0.7\,\hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.

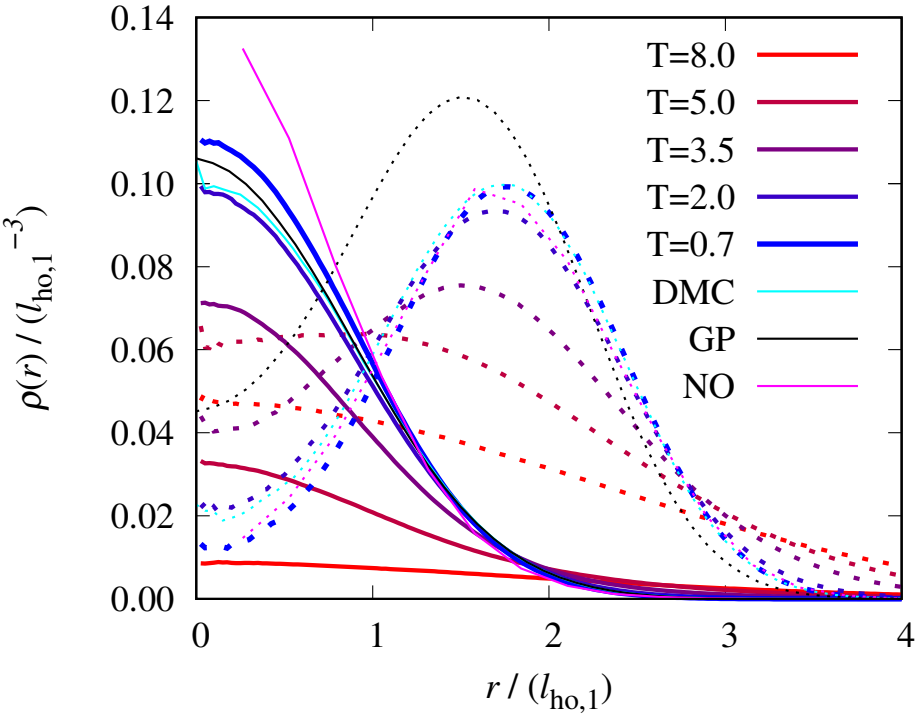


Graf. 5.13: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ (gore) i $\rho_9(r,r')$ (dolje) jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 8.0\ \hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.

5.2.4 Separirani režim: ljuske

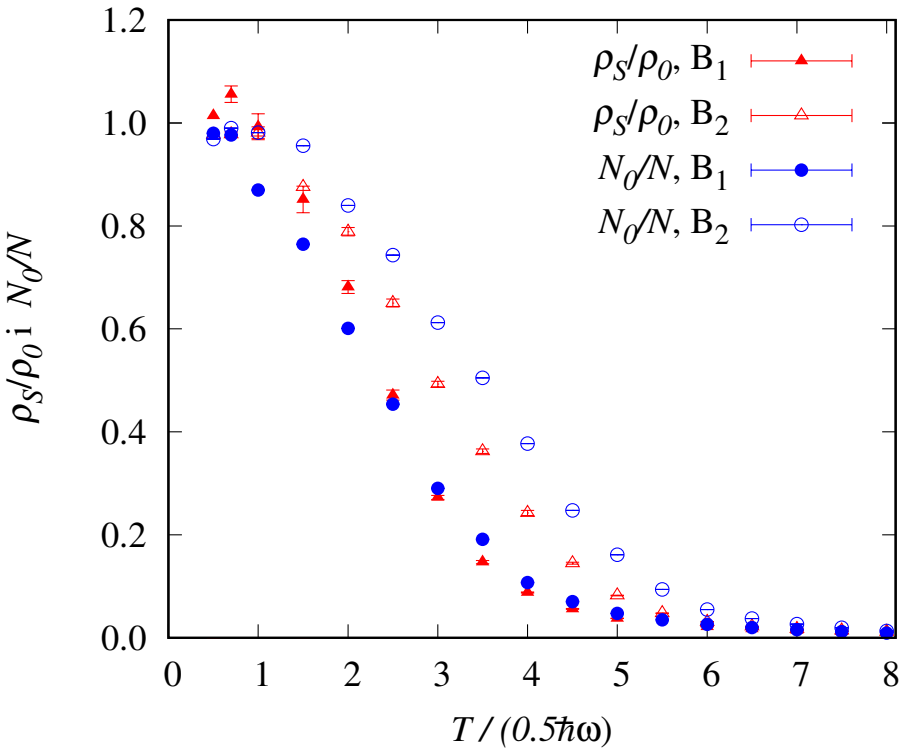
Rezultati procjene profila gustoće za obje komponente, B_1 i B_2, pri apsolutnoj nuli i konačnim temperaturama su prikazani na Grafu 5.14 zajedno s teorijskim Gross-Pitaevskii predviđanjem. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Profili vanjske komponente, B_1, su 7 puta uvećani zbog preglednosti. Za sve temperature više od $T > 5\ \hbar\omega/2$, komponente su prostorno miješane i smanjenjem temperature, B_1 komponenta formira vanjsku ljusku. PIMC predviđanje za niske temperature poklapa se s DMC predviđanjem. Gross-Pitaevskii se predviđanje poklapa

za komponentu B_2 dok se znatno razlikuje od PIMC-a i DMC-a za vanjsku komponentu. Zelene linije predstavljaju profile prirodnih orbitala.



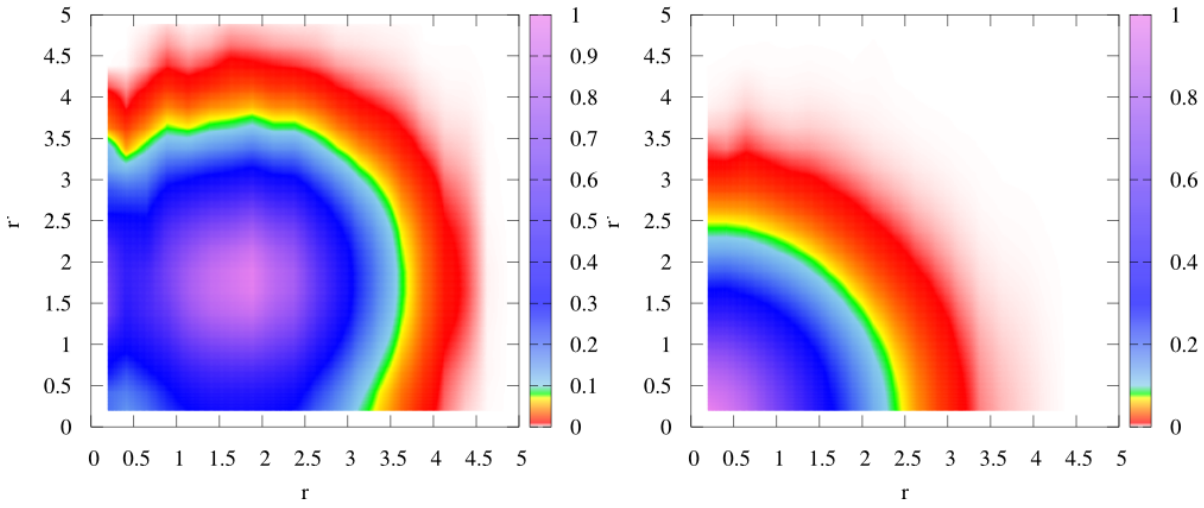
Graf. 5.14: Profili gustoće za B_1 (isprekidane linije) i B_2 (pune linije) procijenjeni iz minimuma vanjskog harmoničkog potencijala u separiranom ljuskastom režimu. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. PIMC se rezultati pri niskim temperaturama poklapaju s DMC rezultatima. GP predviđa uže profile vanjske komponente dok se profili za unutarnju komponentu slažu. Profili prirodnih orbitala (NO) su prikazani zelenom linijom.

Na Grafu 5.15 su prikazani rezultati procjene udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata. Sve vrijednosti dosežu jedinicu u limesu apsolutne nule. Suprafluidnost i udio kondenzata vanjske komponente brže padaju povećavanjem temperature od unutarnje komponente. I u ovom se režimu pojavljuje presijecanje krivulja omjera N_0/N i ρ_S/ρ oko $T \approx 3\ \hbar\omega/2$.

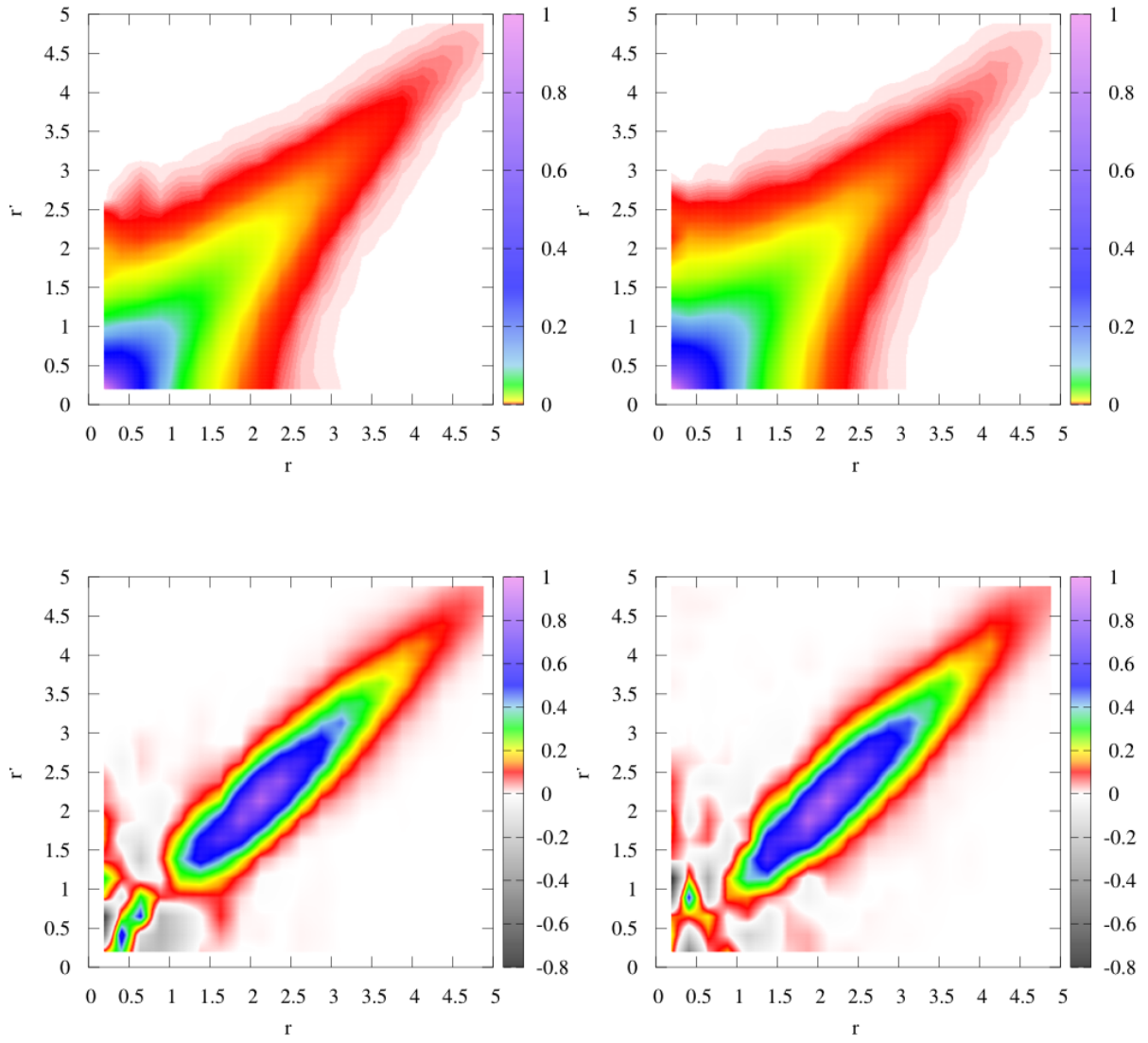


Graf. 5.15: Temperaturna ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za B_1 i B_2 u separiranom ljuskastom režimu. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Zanimljivo je da oko $T = 3\ \hbar\omega/2$ udio Bose-Einstenovog kondenzata postaje veći od udjela suprafluida za obje komponente. Udio suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata brže opadaju za vanjsku komponentu B_1.

Na grafovima 5.16 i 5.17 su prikazane neke komponente jednočestične matrice gustoće, $\rho_l(r, r')$ za dvije temperature, $T = 0.7\ \hbar\omega/2$ (Graf 5.16) i $T = 8.0\ \hbar\omega/2$ (Graf 5.17).



Graf. 5.16: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 0.7\,\hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.



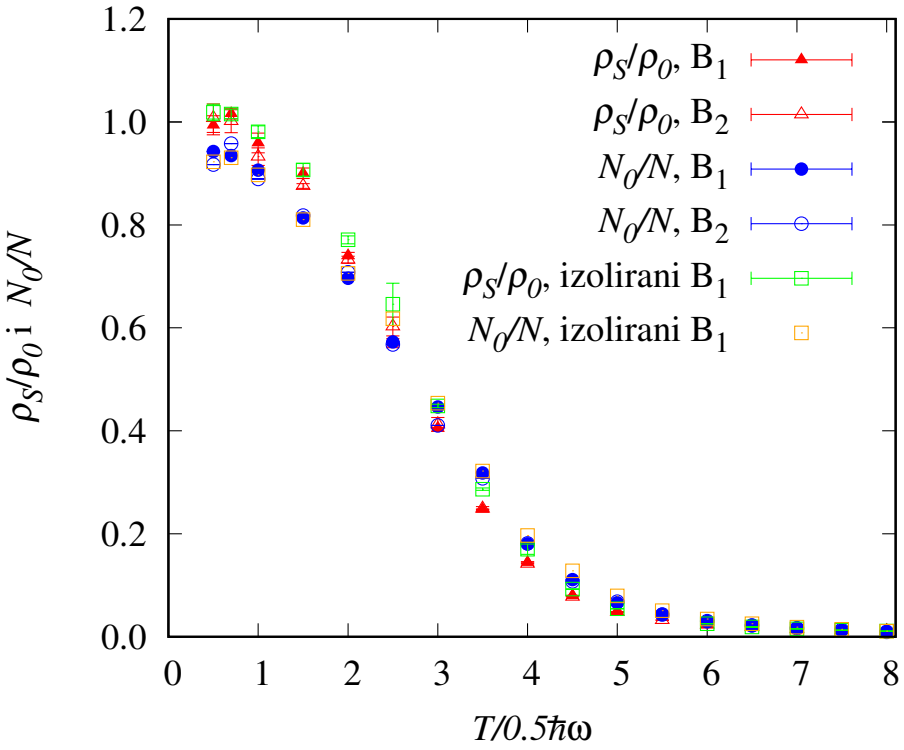
Graf. 5.17: Rezultati komponente $\rho_0(r,r')$ (gore) i $\rho_9(r,r')$ (dolje) jednočestične matrice gustoće za komponentu B_1 (lijevo) i B_2 (desno) pri temperaturi $T = 8.0\ \hbar\omega/2$. Rezultati nisu normirani.

5.2.5 Jednokomponentni sustav

Zbog boljeg razumijevanja sustava, proračunali smo dva dodatna slučajeva s jednom komponentom u harmoničkoj zamci te usporedili rezultate ovisnosti udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata s rezultatima za miješani režim.

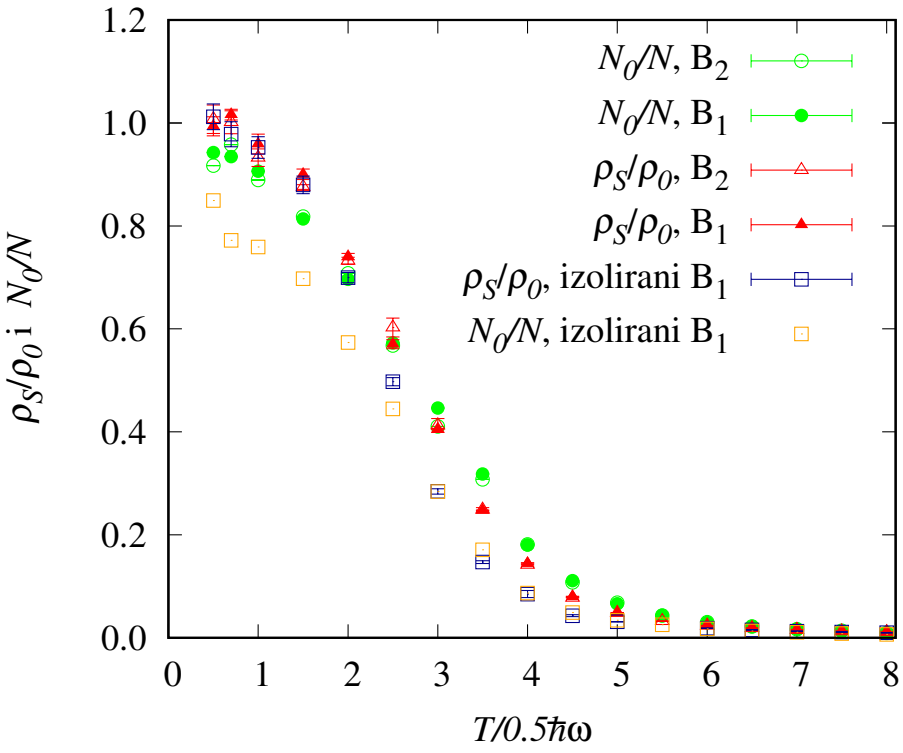
Na Grafu 5.18 su prikazani rezultati za jednokomponentni sustav 50 atoma jedne vrste iz miješanog režima. Drugim riječima, izolirali smo jednu komponentu iz miješanog režima

i usporedili rezultate s rezultatima za miješani režim. Ovisnost se udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata poklapa za oba slučaja. Dakle, u miješanom režimu prisustvo jedne komponente ne utječe značajno na suprafluidnost i Bose-Einsteinov kondenzat druge. Zanimljivo je da i u slučaju kada izoliramo samo jednu komponentu postoji temperaturni dio na kojem je N_0/N veći od ρ_S/ρ.



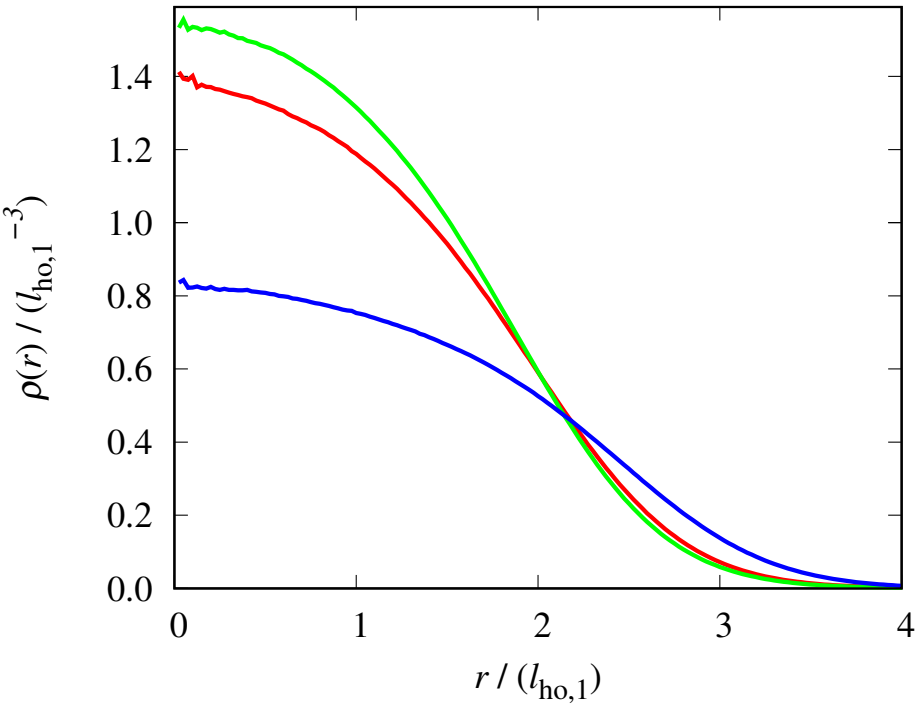
Graf. 5.18: Temperaturna ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za B_1 i B_2 u miješanom režimu uspoređena sa slučajem kada je jedna komponente izolirana. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$. Ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata se poklapa za oba slučaja. Dakle, u miješanom režimu prisustvo jedne komponente ne utječe značajno na suprafluidnost i kondenzat druge.

Na Grafu 5.19 su prikazani rezultati za jednokomponentni slučaj s tri puta jačim interakcijama od prethodnog slučaja prikazanog na Grafu 5.18 i uspoređeni sa slučajem u miješanom režimu. Očito je da povećanjem jačine interakcija nestaje dio na kojem je N_0/N veći od ρ_S/ρ. Također, povećanjem interakcija se očekivano smanjuje udio Bose-Einsteinovog kondenzata.



Graf. 5.19: Temperaturna ovisnost udjela suprafluida i Bose-Einsteinovog kondenzata za B_1 i B_2 u miješanom režimu uspoređena sa slučajem kada je jedna komponente izolirana, ali s tri puta jačim interakcijama. Temperatura je dana u jedinicama $\hbar\omega/2$.

Zanimljivo je usporediti profile gustoće za ova tri slučaja. Na Grafu 5.20 je prikazana usporedba profila gustoće B_1 komponente iz miješanog režima (crvena linija), izolirane B_1 komponente iz miješanog režima (zelena linija) i izolirane B_1 komponente s tri puta jačim interakcijama pri temperaturi $T = 2.0\,\hbar\omega/2$. Očekivani je da uklanjanje druge komponente iz mješavine uzrokuje to da se prva komponente skupi prema sredini što je i vidljivo iz usporedbe. S druge strane je očekivano da će povećanje unutarnjih interakcija između B_1 atoma uzrokovati širenje profila.



Graf. 5.20: Usporedba profila gustoće B_1 komponente iz miješanog režima (crvena linija), izolirane B_1 komponente iz miješanog režima (zelena linija) i izolirane B_1 komponente s tri puta jačim interakcijama pri temperaturi $T = 2.0\,\hbar\omega/2$.

6 ZAKLJUČAK

Egzaktnim kvantnim Monte Carlo metodama proučili smo jednodimenzionalni helij-4 kao primjer jako interagirajućeg bozonskog sustava unutar sumjerljive optičke rešetke. Odredili smo temperaturnu ovisnost udjela suprafluida, jednočestične matrice gustoće, funkcije korelacija parova te statičkog strukturnog faktora. Procjena se suprafluidnosti pri niskim LT poklapa za obje korištene metode, DMC i PIMC. Proračunali smo svojstva sustava za četiri linijske gustoće, dvije u robusnom režimu i dvije u osjetljivom suprafluidnom režimu. Uočili smo da se u robusnom režimu očekivano suprafluidnost narušava te sustav prelazi u Mott-izolator fazu pri konačnoj dubini vanjskog potencijala. Što je veći Luttingerov parametar, kritična dubina prijelaza je veća. Bez obzira na razlike u modelima, kada je Luttingerov parametar jednak, poklapaju se teorijska predviđanja i eksperimentalni rezultati za kritičnu dubinu potencijala za prijelaz iz suprafluida u Mottov izolator. To je primjer univerzalnosti LL teorije. Za provjeru osjetljivog režima, kada je Luttingerov parametar manji od 2, potrebne su puno duže simulacije i veće duljine. U našim rezultatima nije potpuno jasno je li kritična dubina potencijala konačna ili infinitezimalno mala što je očekivano. Zanimljivo je da u slučaju potpunog narušenja suprafluidnosti sustav nije lokaliziran. Sustav je proučen za slučaj jednog atoma po jami optičke rešetke. Zanimljivo bi bilo proučiti slučajeve s manje ili više atoma po jami. Kod proračuna na $T = 0$ K pokazana je defektima inducirana suprafluidnost [17], pa bi bilo zanimljivo vidjeti kako konačne temperature utječu na induciranu suprafluidnost. U ovom radu smo kod dubljih rešetki za male LT uočili zanimljiv efekt rasta suprafluidnosti s povećanjem LT-a pa bi zanimljivo bilo istražiti u kojoj se mjeri taj efekt pojavljuje kod slučajeva s više ili manje atoma po jami. Zanimljivo bi bilo proučiti i sustav u kvazi-periodičkom potencijalu kao primjeru neuređenog sustava. Glavni izazov s kvazi-periodičkom rešetkom je pronaći raspon parametara potencijala za koje je sustav fizikalno zanimljiv, odnosno za koji mu se ponašanje u bitnom razlikuje od onoga u periodičkom potencijalu.

U drugom dijelu istraživanja uočili smo prijelaz iz jednodimenzionalnog u dvodimenzionalni sustav helija-4 unutar nanopore radijusa $R = 4$ Å. Pri niskoj gustoći, $\rho_0 = 0.15$ Å^{-1}, helij se raspodijeli po sredini nanopore s maksimumom na srednjoj liniji. Pri većoj linijskoj gustoći, $\rho_0 = 0.60$ Å^{-1}, helij se raspodijeli u dvodimenzionalni cilindar oko sredine nanopore. Pri niskoj gustoći, kada je helij raspodijeljen po sredini nanopore, sustav se ponaša u skladu s LL teori-

jom koja opisuje jednodimenzionalne sustave, tj. predviđanja teorije se poklapaju s rezultatima simulacija. Ovisnost udjela suprafluida, ρ_S/ρ_0, skalira s umnoškom duljine i temperature, LT, i jednočestična matrica gustoće, $n(x)$, algebarski opada s udaljenošću s dugodosežnim oscilacijama što se i očekuje iz LL teorije. Zanimljivo je da čak i kada je distribucija oko centra pore široka sustav još uvijek pokazuje svojstva 1D LL sustava. To može biti korisno za eksperimentalno postizanje 1D sustava. S druge strane, pri visokoj linijskoj gustoći, kada je sustav raspodijeljen u dvodimenzionalni cilindar oko sredine nanopore, jednočestična matrica gustoće, $n(x)$, i funkcija korelacije parova, $g(x)$, ne pokazuju dugodosežne oscilacije. $n(x)$ pokazuje glatki algebarski rep karakterističan za dvodimenzionalne sustave i temperaturnu ovisnost koja indicira suprafluidnu temperaturu prijelaza $T_c = 0.15 - 0.20$ K. Udio suprafluida, ρ_S/ρ_0, pokazuje efekte konačne veličine sustava iznad T_c, a ispod je ovisnost ista za sve velike duljine, L. Suprafluidnost se pri višim linijskim gustoćama ponaša u skladu s Kosterlitz-Thouless teorijom kojom se opisuje dvodimenzionalni sustav. Ukratko, sustav pri niskim linijskim gustoćama pokazuje ponašanje jednodimenzionalnog sustava kojeg je moguće opisati LL teorijom, a pri višim linijskim gustoćama pokazuje svojstva karakteristična za dvodimenzionalni sustav. U prijašnjim PIMC istraživanjima [25] u kojima je proučavan helij ^{4}He u širim porama uočeno je da temperatura prijelaza raste povećanjem radijusa nanopore. Bilo bi zanimljivo detaljnije ispitati pri kolikoj širini distribucije oko centra dolazi do narušavanje 1D karaktera. Također, zanimljivo bi bilo zaključiti je li nužno da distribucija ima maksimum izvan centra kako bi došlo do prijelaza u 2D karakter. Dakle, općenito ispitati granice prijeleza iz 1D u 2D za različite širine pora, gustoća i ostalih relevantnih parametara.

U trećem smo dijelu istraživanja proračunali temperaturnu ovisnost suprafluidnosti i Bose-Einsteinovog kondenzata odbojnih bozonskih mješavina u trodimenzionalnoj harmoničkoj zamci. Proučili smo tri karakteristični faze u kojima dvokomponentni sustav može biti ovisno o omjerima interakcija. Uočili smo poklapanje niskotemperaturnih predviđanja PIMC-a i DMC-a što je pokazatelj da su uklonjeni svi mogući izvori pogreške. U miješanom i ljuskastom režimu udio suprafluida je 1 u limesu niske temperature, dok je u nesimetričnom separiranom režimu uočena anizotropna suprafluidnost. Procjena je različita ovisno o izboru osi rotacije. Udio suprafluida je samo 0.8 ako se promatra oko osi koja je okomita na os koju određuju centri mase.

Zanimljivo je da udio Bose-Einsteinovog kondenzata, koji je tipično manji od udjela suprafluida, postaje veći kako se temperatura povećava. Taj efekt je uočen i za jednokom-

ponentni sustav s jednakim interakcijama. U slučaju jačih interakcija, efekt nestaje i udio Bose-Einsteinovog kondenzata je manji od suprafluida za sve temperature. Nije očekivano da naši rezultati u trećem dijelu istraživanja ovise o detaljima interakcija jer je prethodno uočena univerzalnost za odabrane parametre modela.

Nastavno na ovo istraživanje bilo bi zanimljivo istražiti utjecaj nesferičnosti vanjskog potencijala na suprafluidnost i kondenzat. Također, utjecaj nesimetričnosti broja atoma, N_1/N_2, i mase, m_1/m_2. Uočeno je da GP opis znatno odstupa od DMC predviđanja u slučaju nesimetričnosti masa dviju komponenti [64]. Posebno zanimljivo bi bilo proračunati svojstva dvokomponentnog sustava s privlačnim interakcijama [69] na konačnim temperaturama. No za takve proračune nam treba znatno brže računalo ili implementacija bolje aproksimacije potencijalnog dijela akcije. Naime, ultrahladne kapljice zahtijevaju minimalni broj atoma za formiranje, koji je u nedavnim eksperimentima procijenjen na više od 3000 atoma [70], što je izvan dosega trenutne PIMC simulacije i dostupnih resursa. No iz kvalitativne usporedbe gustoće, možemo nešto zaključiti o očekivanom udjelu Bose-Einsteinovog kondenzata ultrahladnih kapljica. Iz rada [73] se predviđa da je tipična eksperimentalna gustoća četiri do šest redova veličine manja od gustoće tekućeg helija-4, dok je gustoća odbojnog sustava u miješanom režimu (Graf 5.5) tri reda veličine manja od gustoće kapljica, odnosno sedam do devet redova veličine manja od tekućeg helija-4. Ako uzmemo u obzir da udio Bose-Einsteinovog kondenzata pada povećanjem gustoće [119], možemo očekivati da će udio Bose-Einsteinovog kondenzata kapljica biti između 10 % i 90 % pri apsolutnoj nuli.

LITERATURA

[1] I. Bloch, J. Dalibard i W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).

[2] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. San(De) i U. Sen, Advances in Physics **56**, 243 (2007).

[3] A. Imambekov, T. L. Schmidt i L. I. Glazman, Rev. Mod. Phys. **84**, 1253 (2012).

[4] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac i M. Rigol, Rev. Mod. Phys. **83**, 1405 (2011).

[5] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981).

[6] A. J. Vidal, New J. Phys. **18**, 055013 (2016).

[7] T. Giamarchi i H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).

[8] L. I. Glazman, I. M. Ruzin i B. I. Shklovskii, Phys. Rev. B **45**, 8454 (1992).

[9] M. A. Cazalilla, J. Phys. B **37**, S1 (2004).

[10] G. Boéris, L. Gori, M. D. Hoogerland, A. Kumar, E. Lucioni, L. Tanzi, M. Inguscio, T. Giamarchi, C. D'Errico, G. Carleo, G. Modugno i L. Sanchez-Palencia, Phys. Rev. A **93**, 011601(R) (2016).

[11] F. De Soto i M. C. Gordillo, J. Low Temp. Phys. **171**, 348 (2013).

[12] F. De Soto i M. C. Gordillo, Phys. Rev. A **85**, 013607 (2012).

[13] C. Carbonell-Coronado, F. De Soto i M. C. Gordillo, Phys. Rev. A **87**, 063631 (2013).

[14] C. Carbonell-Coronado, F. De Soto i M. C. Gordillo, Phys. Rev. A **90**, 013630 (2014).

[15] G. E. Astrakharchik, K. V. Krutitsky, M. Lewenstein i F. Mazzanti, Phys. Rev. A **93**, 021605(R) (2016).

[16] E. Haller, R. Hart, M. J. Mark, J. G. Danzl, L. Reichsöllner, M. Gustavsson, M. Dalmonte, G. Pupillo i H.-C. Nägerl, Nature (London) **466**, 597 (2010).

[17] G. E. Astrakharchik, K. V. Krutitsky, M. Lewenstein, F. Mazzanti i J. Boronat, Phys. Rev. A **96**, 033606 (2017).

[18] E. Krotscheck i M. D. Miller, Phys. Rev. B **60**, 13038 (1999).

[19] M. Boninsegni i S. Moroni, J. Low Temp. Phys. **118**, 1 (2000).

[20] M. C. Gordillo, J. Boronat i J. Casulleras, Phys. Rev. B **61**, R878(R) (2000).

[21] G. Bertaina, M. Motta, M. Rossi, E. Vitali i D. E. Galli, Phys. Rev. Lett. **116**, 135302 (2016).

[22] A. Del Maestro, M. Boninsegni i I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **106**, 105303 (2011).

[23] A. Del Maestro, Int. J. Mod. Phys. B **26**, 1244002 (2012).

[24] B. Kulchytskyy, G. Gervais i A. Del Maestro, Phys. Rev. B **88**, 064512 (2013).

[25] L. Vranješ Markić i H. R. Glyde, Phys. Rev. B **92**, 064510 (2015).

[26] L. Vranješ Markić, H. Vrcan, Z. Zuhrianda i H. R. Glyde, Phys. Rev. B **97**, 014513 (2018).

[27] S. N. Bose, Z. Phys. **26**, 178 (1924).

[28] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., Phys. Math. Kl. Bericht **22**, 261 (1924).

[29] F. London, Nature (London) **141**, 643 (1938).

[30] F. London, Superfluids, Vol. 1: Macroscopic Theory of Super-conductivity (Wiley, New York, 1950).

[31] F. London, Superfluids, Vol. 2: Macroscopic Theory of Super-fluid Helium (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1954).

[32] O. Penrose i L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).

[33] J. Wilks, The Properties of Liquid and Solid Helium (Clarendon Press, Oxford, UK, 1967).

[34] A. J. Leggett, Quantum Liquids: Bose Condensation and Cooper Pairing in Condensed Matter Systems (Oxford University Press, Oxford, UK, 2006).

[35] D. M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).

[36] M. Boninsegni, N. Prokof'ev i B. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **96**, 070601 (2006).

[37] J. M. Kosterlitz i D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).

[38] D. R. Nelson i J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).

[39] D. J. Bishop i J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **40**, 1727 (1978).

[40] J. D. Reppy, J. Low Temp. Phys. **87**, 205 (1992).

[41] G. A. Csáthy, J. D. Reppy i M. H. W. Chan, Phys. Rev. Lett. **91**, 235301 (2003).

[42] A. Del Maestro i I. Affleck, Phys. Rev. B **82**, 060515(R) (2010).

[43] C. J. Myatt, E. A. Burt, R. W. Ghrist, E. A. Cornell i C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **78**, 586 (1997).

[44] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman i E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. **81**, 1543 (1998).

[45] P. Maddaloni, M. Modugno, C. Fort, F. Minardi i M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **85**, 2413 (2000).

[46] S. B. Papp, J. M. Pino i C. E.Wieman, Phys. Rev. Lett. **101**, 040402 (2008).

[47] S. Sugawa, R. Yamazaki, S. Taie i Y. Takahashi, Phys. Rev. A **84**, 011610 (2011).

[48] S. Stellmer, R. Grimm i F. Schreck, Phys. Rev. A **87**, 013611 (2013).

[49] G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati i M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **89**, 190404 (2002).

[50] G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F.Minardi i M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. **100**, 210402 (2008).

[51] A. D. Lercher, T. Takekoshi, M. Debatin, B. Schuster, R. Rameshan, F. Ferlaino, R. Grimm i H. C. Nägerl, Eur. Phys. J. D **65**, 3 (2011).

[52] D. J. McCarron, H.W. Cho, D. L. Jenkin, M. P. Köppinger i S. L. Cornish, Phys. Rev. A **84**, 011603 (2011).

[53] B. Pasquiou, A. Bayerle, S. M. Tzanova, S. Stellmer, J. Szczepkowski, M. Parigger, R. Grimm i F. Schreck, Phys. Rev. A **88**, 023601 (2013).

[54] L. Wacker, N. B. Jørgensen, D. Birkmose, R. Horchani, W. Ertmer, C. Klempt, N. Winter, J. Sherson i J. J. Arlt, Phys. Rev. A **92**, 053602 (2015).

[55] F. Wang, X. Li, D. Xiong i D. Wang, J. Phys. B **49**, 015302 (2016).

[56] T. A. Schulze, T. Hartmann, K. K. Voges, M. W. Gempel, E. Tiemann, A. Zenesini i S. Ospelkaus, Phys. Rev. A **97**, 023623 (2018).

[57] A. Trautmann, P. Ilzhöfer, G. Durastante, C. Politi, M. Sohmen, M. J. Mark i F. Ferlaino, Phys. Rev. Lett. **121**, 213601 (2018).

[58] A. Burchianti, C. D'Errico, S. Rosi, A. Simoni, M. Modugno, C. Fort i F. Minard, Phys. Rev. A **98**, 063616 (2018).

[59] Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne i Eite Tiesinga, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).

[60] Josep Taron, Am. J. Phys. **81**, 603 (2013).

[61] H. Pu i N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. **80**, 1130 (1998).

[62] P. Öhberg, Phys. Rev. A **59**, 634 (1999).

[63] Kean Loon Lee, Nils B. Jørgensen, I-Kang Liu, Lars Wacker, Jan J. Arlt i Nick P. Proukakis, Phys. Rev. A **94**, 013602 (2016).

[64] V. Cikojević, L. Vranješ Markić i J. Boronat, New J. Phys. **20**, 085002 (2018).

[65] T. L. Ho i V. B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. **77**, 3276 (1996).

[66] L. Wen, H. Guo, Y. Wang, A. Hu, H. Saito, C. Dai i X. Zhang, Phys. Rev. A **101**, 033610 (2020).

[67] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman i E. A. Cornell Science **269**, 198 (1995).

[68] L. Pitaevskii, S. Stringari, Bose-Einstein Condensation (Oxford University Press, 2003).

[69] D. S. Petrov, Phys. Rev. Lett. **115**, 155302 (2015).

[70] C. R. Cabrera, L. Tanzi, J. Sanz, B. Naylor, P. Thomas, P. Cheiney i L. Tarruell, Science **359**, 301 (2018).

[71] P. Cheiney, C. R. Cabrera, J. Sanz, B. Naylor, L. Tanzi i L. Tarruell, Phys. Rev. Lett. **120**, 135301 (2018).

[72] G. Semeghini, G. Ferioli, L. Masi, C. Mazzinghi, L. Wolswijk, F. Minardi, M. Modugno, G. Modugno, M. Inguscio i M. Fattori, Phys. Rev. Lett. **120**, 235301 (2018).

[73] V. Cikojević, K. Dželalija, P. Stipanović, L. Vranješ Markić i J. Boronat, Phys. Rev. B **97**, 140502(R) (2018).

[74] C. Staudinger, F. Mazzanti i R. E. Zillich, Phys. Rev. A **98**, 023633 (2018).

[75] V. Cikojević, L. Vranješ Markić, G. E. Astrakharchik i J. Boronat, Phys. Rev. A **99**, 023618 (2019).

[76] A. Tononi, Condens. Matter **4**, 20 (2019).

[77] A. Tononi, A. Cappellaro i L Salasnich, New J. Phys. **20**, 125007 (2018).

[78] L. Salasnich, Phys. Rev. Lett. **118**, 130402 (2017).

[79] V. Cikojević, Vranješ Markić i J. Boronat, New J. Phys. **22**, 053045 (2020).

[80] H. R. Glyde, Rep. Prog. Phys. **81** 014501 (2018).

[81] L. Pollet, Rep. Prog. Phys. **75**, 094501 (2012).

[82] I. Bloch, J. Dalibard i S. Nascimbene, Nature Physics **8**, 267 (2012).

[83] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller i E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

[84] Tao Pang, Am. J. Phys. **82**, 980 (2014).

[85] S. A. Chin, Phys. Rev. A **42**, 6991 (1990).

[86] J. Boronat i J. Casulleras, Phys. Rev. B **49**, 8920 (1994).

[87] R. P. Feynxnan, Statistical Mechanics (Benjamin, New York, 1972.)

[88] H. Trotter, Proc. Am. Math. **10**, 545 (1959).

[89] M. Boninsegni, J. Low Temp. Phys. **141**, 27 (2005).

[90] M. Boninsegni, N. V. Prokof'ev i B. V. Svistunov, Phys. Rev. E **74**, 036701 (2006).

[91] R. Rota, Path Integral Monte Carlo and Bose-Einstein condensation in quantum fluids and solids, Ph.D. thesis (Universitat Politècnica de Catalunya, 2011.)

[92] E. L. Pollock i D. M. Ceperley, Phys. Rev. B, **36**, 8343 (1987).

[93] S. Zhang, N. Kawashima, J. Carlson i J.E. Gubernatis, Phys. Rev. Lett. **74**, 1500 (1995).

[94] C. J. Pethick i H. Smith, Bose-Einsten Condensation in dilute gases (Cambridge University Press, Second edition, 2008.)

[95] J. L. DuBois i H. R. Glyde, Phys. Rev. A **63**, 023602 (2001).

[96] R. A. Aziz, F. R. W. McCourt i C. C. K. Wong, Mol.Phys. **61**, 1487 (1987).

[97] 3R. J. Donnelly, Experimental Superfluidity (The University of Chicago Press, Chicago, 1967.), Tablica 14

[98] E. L. Pollock i D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **36**, 8343 (1987).

[99] P. Sindzingre, M. L. Klein i D. M. Ceperley, Phys. Rev. Lett. **63**, 1601 (1989).

[100] F. Dalfovo, S Giorgini, L. P. Pitaevskii i S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 April (1999).

[101] W. Ketterle i N. J. van Druten, Phys. Rev. A **54**, 656 (1996).

[102] https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/linalg.html

[103] K. Dželalija i L. Vranješ Markić, Phys. Rev. A **101**, 013626 (2020).

[104] N. V. Prokof'ev i B. V. Svistunov, Phys. Rev. B **61**, 11282 (2000).

[105] T. Giamarchi, Quantum Physics in One Dimension (Oxford University Press, Oxford, 2004).

[106] A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **25** (22), 1543 (1970).

[107] E. H. Lieb i W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605 (1963).

[108] G.E. Astrakharckih, Quantum Monte Carlo Study of Ultracold Gases (Università degli Studi di Trento, Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali, Dottorato di Ricerca in Fisica, 2004).

[109] J. Bossy, T. Hansen i H. R. Glyde, Phys. Rev. B **81**, 184507 (2010).

[110] N. Wada, Y. Minato, T. Matsushita i M. Hieda, J. Low Temp. Phys. **162**, 549 (2011).

[111] J. Taniguchi, K. Demura i M. Suzuki, Phys. Rev. B **88**, 014502 (2013).

[112] D. M. Ceperley i E. L. Pollock, Phys. Rev. B **39**, 2084 (1989).

[113] P. A. Whitlock, G. V. Chester i M. H. Kalos, Phys. Rev. B **38**, 2418 (1988).

[114] M. C. Gordillo i J. Boronat, J. Low Temp. Phys. **157**, 296 (2009).

[115] N. Wada, Y. Minato, T. Matsushita i M. Hieda, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 111012 (2008).

[116] J. Taniguchi, Y. Aoki i M. Suzuki, Phys. Rev. B **82**, 104509 (2010).

[117] P. Roman, Advanced Quantum Theory (Addison-Wesley, Reading, MA, 1965).

[118] G. E. Astrakharchik, J. Boronat, J. Casulleras, S. Giorgini, Phys. Rev. A **66**, 023603 (2002).

[119] S. Giorgini, J. Boronat i J. Casulleras, Phys. Rev. A **60**, 5129 (1999).

ŽIVOTOPIS

Krešimir Dželalija je rođen 20. ožujka 1992. godine u Splitu. Završio je osnovnu školu „Spinut“ u Splitu te upisao III. prirodoslovno-matematičku gimnaziju u Splitu, a maturirao 2010. godine. Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu je upisao 2010. godine, a diplomirao 2015. godine. Prvu godinu poslijediplomskog doktorskog studija „Atomska i molekularna fizika“ na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Zagrebu upisao je 2015./2016., a od 1. listopada 2016. godine je zaposlen kao asistent na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Splitu u sklopu projekta „razvoja karijera mladih istraživača – izobrazba novih doktora znanost“ HRZZ-a.

Krešimir Dželalija do sada je prezentirao svoja istraživanja u obliku postera na 2 domaće i 1 međunarodnoj znanstvenoj konferenciji te objavio 3 CC znanstvena rada, a još jedan je poslan na recenziju. Sljedeća su 2 rada vezana uz temu doktorskog rada:

1. Dželalija, Krešimir; Vranješ Markić, Leandra: *Quantum Monte Carlo study of strongly interacting bosonic one-dimensional systems in periodic potentials*, Physical Review A **101**, 013626 (2020);

2. Vranješ Markić, Leandra; Dželalija, Krešimir; Glyde, Henry: *Crossover from one to two dimensions in liquid ^{4}He in a nanopore*, Physical Review B **101**, 104505 (2020).

Ostali radovi koji nisu vezani uz temu:

1. Cikojević, Viktor; Dželalija, Krešimir; Stipanović, Petar; Vranješ Markić. Leandra; Boronat, Jordi: *Ultradilute quantum liquid drops*, Physical Review B **97**, 140502(R) (2018).