

# Kvantesimulation af kvasipartikler

Af Georg M. Bruun, Institut for Fysik og Astronomi, Aarhus Universitet

Kvantemekanikkens ligninger er så komplekse, at de kun kan løses eksakt for nogle få simple systemer. Et centralt problem i den moderne fysik er derfor at forstå realistiske systemer bestående af mange vekselvirkende partikler. I denne artikel diskuterer vi, hvordan man heldigvis i mange tilfælde kan forsimple problemet drastisk ved at beskrive sådanne systemer ved hjælp af partikellignende objekter – de såkaldte kvasipartikler. Vi forklarer, hvordan denne elegante teori, udviklet af den russiske fysiker Landau og anvendt overalt i fysikken, fornyligt er blevet undersøgt i epokegørende eksperimenter bl.a. ved Aarhus Universitet ved brug af kvantesimulatorer bestående af atomare gasser.

## Kvasipartikler

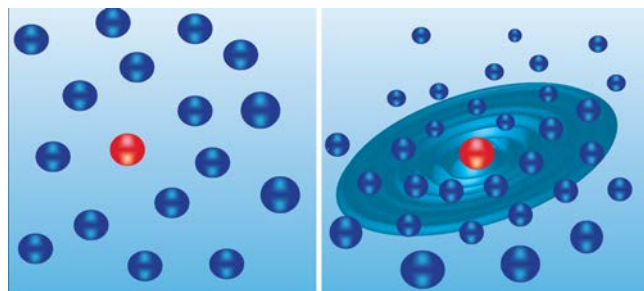
Vi har alle en klar fornemmelse af, hvad en partikel er, og vi bruger hele tiden vores intuition til at forudsæ, hvordan de opfører sig. Fx kan langt de fleste kaste og gribe en tennisbold med en vis sikkerhed. Den præcise matematiske formulering af sådanne makroskopiske partiklers bevægelse, dvs. deres position og hastighed, blev formuleret af Isaac Newton i hans verdensberømte værk “Principia” i 1687. De er derfor kendt som Newtons love. I begyndelsen af det 20. århundrede gennemrystedes fysikken af endnu en revolution, da det gik op for Niels Bohr og hans kollegaer, at Newtons love bryder sammen på små længdeskalaer, hvor de skal erstattes af den langt mere komplicerede kvantemekanik. De grundlæggende kvantemekaniske ligninger er så komplekse, at det selv med de hurtigste computere kun er muligt at løse dem for et meget begrænset antal simple systemer. Et grundlæggende problem i den moderne fysik er derfor at forstå realistiske kvantesystemer, der ofte består af mange partikler på atomar eller subatomar skala.

Her kommer den menneskelige intuition, nu i skikkelse af den russiske fysiker Lev Landau, heldigvis til hjælp, og angiver en genvej til at løse dette problem [1, 2]. Landau udførte følgende tankeeksperiment: start med en idealgas, der består af mange partikler, som ikke vekselvirker med hinanden. Idealgassen er forholdsvis enkel at forstå, da den er beskrevet fuldstændigt af de kvantetilstande, hver enkelt partikel er i. Forestil dig nu, at du langsomt skruer op for vekselvirkningen mellem partiklerne. Landau postulerede så, at med mindre der sker noget drastisk som fx en faseovergang, vil kvantetilstandene af idealgassen kontinuert udvikle sig til kvantetilstandene af det vekselvirkende system, når vekselvirkningsstyrken gradvist øges. Specifikt vil de ikke-vekselvirkende partikler i idealgassen svare én til én til såkaldte kvasipartikler i det vekselvirkende system, se figur 1.

Landau gav endvidere et klart og intuitivt billede af, hvordan vi skal forestille os en kvasipartikel. Hvis man langsomt skruer op for styrken af fx en tiltrækkende vekselvirkning, vil en partikel tiltrække en stadigt større sky af de omkringliggende partikler. Jargonen blandt fysikere er, at partiklen bliver “klædt på” af den omgivende sky. En kvasipartikel kan derfor tænkes som bestående af den “bare” partikel fra idealgassen og den

omkringliggende sky, som illustreret på figur 1.

Det fantastiske ved Landaus kvasipartikelteori er, at den drastisk forenkler beskrivelsen af et ekstremt kompliceret vekselvirkende kvantesystem, så den bliver næsten lige så simpel som for en idealgas: Systemets lave energitilstande består ganske enkelt af en eller flere kvasipartikler. Rent faktisk kan man i mange tilfælde (dog ikke altid!) forstå dynamikken af kvantesystemet ud fra et simpelt intuitivt billede af “almindelige” partikler såsom tennisbolde, der kolliderer med hinanden.



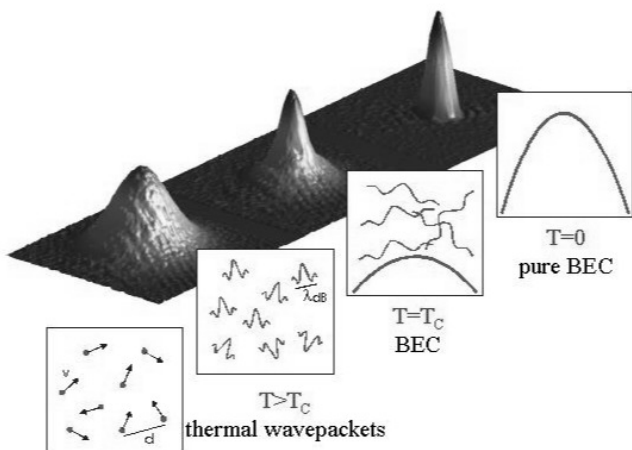
**Figur 1.** Venstre: En partikel i en gas uden vekselvirkninger. Højre: Når der skrues op for en attraktiv vekselvirkning, tiltrækker den de omkringliggende partikler og skaber dermed en kvantemekanisk tilstand, som fysisk bedst kan beskrives som en kvasipartikel. Kvasipartiklens masse er typisk større end den “bare” partikel, fordi den trækker en sky af atomer med sig rundt.

For at beskrive vekselvirkende kvantesystemer ved hjælp af Landaus teori skal man bruge nogle få inputparametre: kvasipartiklernes masse, levetid og deres vekselvirkning. Disse parametre er typisk fænomenologiske, da de er svære at udregne fra den grundlæggende mikroskopiske kvantemekanik. Fx er faste stoffer ofte præget af urenheder og andre ukontrollerede effekter, som i praksis umuliggør en mikroskopisk beregning af kvasipartiklernes egenskaber. Derfor har det indtil fornyligt været svært at udforske det kvantemekaniske grundlag for Landaus teori, altså hvordan kvasipartikler helt præcist dannes mikroskopisk ud fra de “bare” partikler i et kvantesystem.

## Atomare kvantegasser

Det er her atomare kvantegasser kommer ind i billedet. En atomar kvantegas er en sky bestående af fx  $^{39}\text{K}$ -atomer fanget i et vakuumkammer. Atomerne er nedkølet til en ekstremt lav temperatur for at få kvanteeffekter i spil. Den typiske udstrækning af den

kvantemekaniske bølgefunktion for en partikel med massen  $m$  er nemlig givet ved de Broglie-bølgelængden  $\lambda = (2\pi\hbar^2/mk_B T)^{1/2}$ , hvor  $k_B$  og  $\hbar$  er hhv. Boltzmanns og Plancks konstant, og  $T$  er temperaturen. Når temperaturen sænkes, bliver partiklernes bølgepakker derfor større og større, og til sidst begynder de at overlape. Når det sker, bliver partiklernes bølgeegenskaber vigtige, og kvantemekaniske effekter sætter ind. Altså vil kvantemekanik være vigtig for en gas med tætheden  $n$ , når  $n\lambda^3 \sim 1$ , og man siger da, at gassen er kvantedegenereret. Fx indtræder Bose-Einstein-kondensation, som er en udpræget kvantemekanisk effekt, når  $n\lambda^3 \simeq 2.6$  for en idealgas af bosoner, se figur 2. Atomare Bose-Einstein-kondensater er beskrevet i et tidligere nummer af Kvant [3]. Den typiske tæthed for atomare gasser er  $n = 10^{12} - 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , og de skal derfor køles helt ned til temperaturer omkring  $T \simeq 10^{-6} \text{ K}$  for at se kvantemekaniske effekter. Heldigvis har fysikere i en teknologisk tour de force gennem de sidste tyve år udviklet avancerede teknikker, som kan køle atomare gasser helt ned til  $T \simeq 10^{-9} \text{ K}$ . Det har indtil videre givet to Nobelpriser, og det hævdes, at det koldeste sted i universet er i et vakuumkammer med en ultrakold atomar gas her på Jorden [4]!



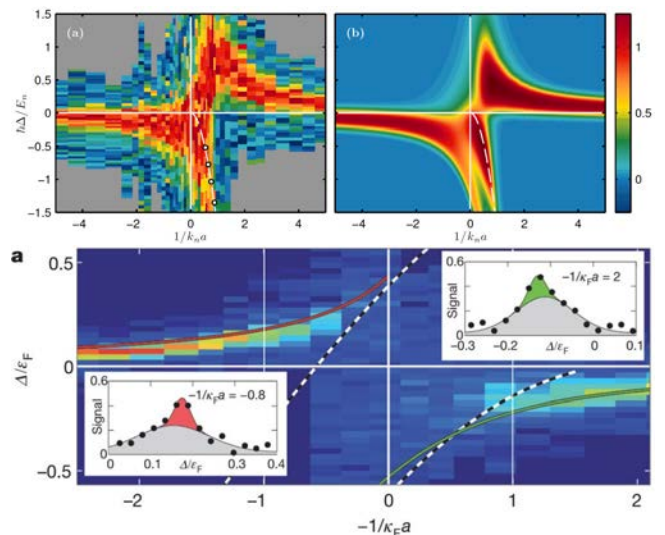
**Figur 2.** Når en sky af bosoner køles ned, bliver udstrækningen af bølgepakken for hver partikel større og større. Ved tilstrækkelig lav temperatur begynder de derfor at overlape, og partiklerne kondenserer ned i den samme kvantemekaniske tilstand ved den kritiske temperatur  $T_c$ . Det resulterende Bose-Einstein-kondensat har en meget høj tæthed. Overfladeplottene er rigtige eksperimentelle data for tætheden af skyen.

Hvorfor arbejder man så hårdt for at lave kvantedegenererede gasser? Grunden er, at de er meget rene, og man kan kontrollere dem i hidtil uset grad ved brug af lasere og magnetfelter. De atomare gasser kan så at sige skræddersys til at have præcis de ønskede egenskaber, og man er samtidigt fri for alle de ukendte parametre, som plager mere konventionelle systemer. Det betyder, at man kan studere kvantemekanik i stor detalje og i regimer, som aldrig er set før. Siden de første Bose-Einstein-kondensater blev realiseret i 1995 med atomare kvantegasser [5, 6], har de derfor udviklet sig til en utrolig fleksibel platform for kvantesimulation: man designer dem til at opføre sig som det system, man gerne vil studere. På den måde kan komplicerede kvantemekaniske problemer udforskes, som ikke kan

løses på selv de hurtigste klassiske computere – ved simpelthen at spørge naturen direkte!

### Kvantesimulation af kvasipartikler

Vi kan nu vende tilbage til kvasipartiklerne. Man kan nemlig bruge atomare gasser til at realisere Landaus tankeeksperiment beskrevet ovenfor. Idéen er ganske enkelt at indsætte et enkelt atom af en anden slags, en såkaldt “urenhed”, i en atomar kvantegas. Urenhedsatomet vekselvirker med kvantegassen og danner dermed en kvasipartikel som illustreret på figur 1. En fantastisk egenskab ved atomare gasser er, at man nemt kan justere styrken på vekselvirkningen mellem atomerne blot ved at ændre et ydre magnetisk felt. Specifikt kan vi ved langsomt at skrue op for vekselvirkningen mellem urenhedsatomet og kvantegassen i detaljer studere, hvordan urenhedsatomet gradvist udvikler sig til en kvasipartikel ved at samle en sky af atomer omkring sig. Det er præcis Landaus tankeeksperiment, som beskrevet tidligere, der danner grundlag for hans teori om kvasipartikler. Han forestillede sig næppe, at det nogensinde ville blive realiseret, men med moderne teknologi blev eksperimentet rent faktisk udført i 2015 i to laboratorier uafhængigt af hinanden!



**Figur 3.** På det øvre plot ses energispektret for et urenhedsatom i et Bose-Einstein-kondensat som funktion af vekselvirkningsstyrken. Plottet til venstre er data fra Aarhus-eksperimentet, og det til højre er de teoretiske beregninger. Bemærk, at x-aksen er  $1/k_n a$ , hvor  $k_n^{-1}$  er proportional med den gennemsnitlige afstand mellem bosonerne. Fra ref. [7]. På det nedre plot ses energispektret målt i Innsbruck-eksperimentet for et urenhedsatom i en Fermigas som funktion af vekselvirkningsstyrken. Linierne er teoretiske beregninger. Fra ref. [8].

Den ene af de to eksperimentelle grupper er ledet af Jan Arlt ved Aarhus Universitet. Først dannede hans gruppe et Bose-Einstein-kondensat af  $^{39}\text{K}$ -atomer, hvorefter de ændrede spintilstanden af nogle få atomer, så de blev til urenhedsatomer. Urenhedsatomerne dannede kvasipartikler ved at vekselvirke med atomerne i kondensatet, og Jan Arlts gruppe kunne nu ændre vekselvirkningen og måle kvasipartiklens energi. På figur 3 ses de eksperimentelle data for kvasipartiklens energi som funktion af den såkaldte spredningslængde  $a$ , der

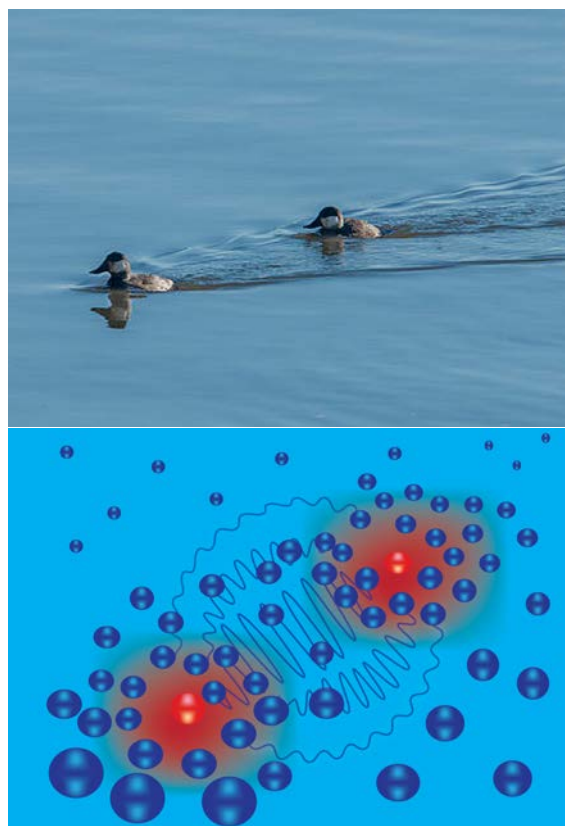
angiver styrken af vekselvirkningen mellem urenhedsatomet og atomerne i kondensatet. Mine samarbejdspartnere og jeg beregnede kvasipartiklens energi ved hjælp af kvantemekanik, og som man kan se på figur 3, er der god overensstemmelse mellem de eksperimentelle data og vores teori. Denne overensstemmelse er bemærkelsesværdig, fordi der ikke er nogle frie parametre i teorien, da atomare gasser som sagt er meget rene. Specielt er det overraskende, hvor godt teori og eksperiment passer for  $1/k_n a = 0$ , hvor spredningslængden er uendelig og vekselvirkningen så stærk som kvantemekanisk muligt! En sådan konsistens mellem teori og eksperiment er sjælden for kvantesystemer med mange partikler, fordi de kvantemekaniske ligninger generelt er så komplicerede. Overensstemmelsen mellem teori og eksperiment gjorde, at vi med sikkerhed kunne annoncere den første observation af en kvasipartikel i et Bose-Einstein-kondensat i verden! Vores resultater blev opnået parallelt med og i skarp konkurrence med en gruppe ledet af Nobelpristageren Eric Cornell ved JILA i Colorado, USA. Efter lidt diskussion frem og tilbage mellem de to grupper, besluttede vi os for, at artiklerne skulle publiceres lige efter hinanden i det anerkendte tidsskrift *Physical Review Letters* [7, 9].

I et tidligere eksperiment udført af en eksperimentel gruppe ledet af Rudolf Grimm i Innsbruck blev  $^{40}\text{K}$ -urenhedsatomer studeret i en ultrakold gas bestående af  $^6\text{Li}$ -atomer. Den væsentlige forskel er, at  $^6\text{Li}$ -atomerne er fermioner, hvorimod atomerne i kondensaterne i Aarhus og JILA er bosoner. Altså studerede man i Innsbruck kvasipartikler i et fermionisk reservoir. Min samarbejdspartner og jeg beregnede kvasipartiklens energi, og som det kan ses på figur 3, var der også her god overensstemmelse mellem teori og eksperiment. Heraf kunne vi konkludere, at vi som de første i verden havde observeret en kvasipartikel i en Fermi-gas med stærke frastødende vekselvirkninger [8]!

## Perspektiver

Den eksperimentelle observation af kvasipartikler i atomare kvantegasser åbner for spændende perspektiver. Som sagt er atomare gasser en ekstremt fleksibel og effektiv platform for kvantesimulation, og den kan nu bruges til at udforske Landaus banebrydende teori om kvasipartikler systematisk og i regimer, som aldrig er set før. Eksperimenterne i Innsbruck, JILA og Aarhus realiserede Landaus tankeeksperiment i virkeligheden, og kombineret med de teoretiske beregninger kunne vi give hans intuition om kvasipartikler et mikroskopisk fundament. Som resultat af de to ovennævnte eksperimenter har mange teoretikere derfor kastet sig over emnet. Selv har jeg fx forudsagt, at kvasipartiklen i kondensatet ret overraskende splitter sig op i to kvasipartikler, når temperaturen er så høj, at kondensatet er tæt på at smelte [10]. En lignende opsplittning af kvasipartikler er forudsagt i varme elektron- og kvark-gluon-plasmaer, hvilket giver en overraskende forbindelse mellem atomare gasser, som jo er de koldeste systemer på jorden med  $T \simeq 10^{-9} - 10^{-6}$  K, og så quark-gluon-plasmaer, som med en temperatur på  $T \simeq 10^{12}$  K er de varmeste systemer på Jorden!

Endvidere vekselvirker to kvasipartikler i et kondensat temmelig stærkt med hinanden via udveksling af lydbølger – lidt ligesom to ænder kan mærke hinanden via de bølger, de udsender som illustreret på figur 4. Vekselvirkningen mellem kvasipartiklerne er tiltrækkende, og jeg har været med til at vise, at den faktisk er stærk nok til at binde to kvasipartikler sammen i et molekyle [11, 12]. Molekyler bestående af to kvasipartikler, ofte kaldet bipolaroner, står bag den elektriske ledningsevne af polymere kæder, organisk magnetoresistans og sågar visse former for eksotisk superledning. Det vil derfor være et stort fremskridt, hvis vi kan studere bipolaroner systematisk ved hjælp af atomare kvantegasser.



**Figur 4.** To kvasipartikler vekselvirker med hinanden ved at udveksle bølger i det omkringliggende medium, lidt ligesom anden til venstre sender bølger mod den til højre.

Alt i alt står vi nu med en enestående mulighed for bruge atomare gasser som effektive kvantesimulatorer til at udforske kvasipartikler. Givet den fundamentale rolle, de spiller for vores forståelse af naturen, vil det højst sandsynligt resultere i en række vigtige resultater. Aarhus Universitet huser et verdensledende miljø inden for dette stærkt konkurrenceprægede felt, bestående af teoretiske såvel som eksperimentelle grupper, der arbejder tæt sammen. Det bliver spændende at se, hvad mere vi kan lære om Landaus geniale idé i de kommende år!

## Litteratur

- [1] L. D. Landau, "The theory of a Fermi liquid," *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 3, no. 6, pp. 920–925, 1957.
- [2] G. Baym and C. Pethick, *Landau Fermi-Liquid Theory: Concepts and Applications*. Wiley-VCH, 1991.

- [3] K. T. Therkildsen and J. W. Thomsen, “Bose Einstein kondensation i atomare gasser – når atomer bliver til kvantebølger,” *KVANT*, vol. 19, no. 2, pp. 20–23, 2008.
- [4] <https://www.smithsonianmag.com/science-nature/the-coldest-place-in-the-universe-8121922/>.
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor,” *Science*, vol. 269, no. 5221, pp. 198–201, 1995.
- [6] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, Nov 1995.
- [7] N. B. Jørgensen, L. Wacker, K. T. Skalmstang, M. M. Parish, J. Levinsen, R. S. Christensen, G. M. Bruun, and J. J. Arlt *Phys. Rev. Lett.*, p. 055302, Jul.
- [8] C. Kohstall, M. Zaccanti, M. Jag, A. Trenkwalder, P. Massignan, G. M. Bruun, F. Schreck, and R. Grimm, “Metastability and coherence of repulsive polarons in a strongly interacting fermi mixture,” *Nature*, vol. 485, pp. 615–618, May 2012.
- [9] M.-G. Hu, M. J. Van de Graaff, D. Kedar, J. P. Corson, E. A. Cornell, and D. S. Jin, “Bose polarons in the strongly interacting regime,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 117, p. 055301, Jul 2016.
- [10] N.-E. Guenther, P. Massignan, M. Lewenstein, and G. M. Bruun, “Bose polarons at finite temperature and strong coupling,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 120, p. 050405, Feb 2018.
- [11] A. Camacho-Guardian and G. M. Bruun, “Landau effective interaction between quasiparticles in a Bose-Einstein condensate,” *Phys. Rev. X*, vol. 8, p. 031042, Aug 2018.
- [12] A. Camacho-Guardian, L. A. Peña Ardila, T. Pohl, and G. M. Bruun, “Bipolarons in a Bose-Einstein condensate,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 121, p. 013401, Jul 2018.



*Georg M. Bruun* er teoretisk fysiker ved Aarhus Universitet og beskæftiger sig med ultrakolde atomare gasser. Hans forskning fokuserer på emner som superledning, transport, magnetisme og topologiske tilstande.

## Røntgenstråling og CT-skanning for gymnasieelever

Af Ole L. Trinhammer, Nanoteket, DTU Fysik

Tredimensionale billeder fra todimensionale skygger? Kan man prøve det selv? Ja, gymnasieklasser kan – med Nanotekets nye røntgenapparater. De fleste kender røntgenbilleder og forstår dem nemt som skygebilleder. Ved en CT-skanning drejes skanneren omkring personen, og skygebillederne sammenstilles ved hjælp af absorptionsloven til et tredimensionalt billede af den indre struktur.

Nanoteket er et undervisningslaboratorium under DTU Fysik for studerende ved DTU og for besøgende gymnasieelever fra hele landet. Det fik sit navn i 2004, hvor vi investerede i skanningprobemikroskoper til nanoteknologi. Siden er der kommet et væld af gymnasieøvelser til: Brændselsceller og solceller som knytter an til instituttets forskning i katalyse, plasmafysikøvelse med  $e/m$ -rør, skanningelektronmikroskoper, hvor elever kan se strukturen i sommerfugleskæl, kvanteoptikudstyr, hvor de kan bryde Bells ulighed, og røntgenudstyr, som jeg her vil koncentrere mig om.

Røntgenudstyret gør det muligt at “se det usynlige”. Røntgen- og neutronsprengningsgrupperne ved instituttet bruger metoderne især til materialeteknologiske formål. Det kan være at undersøge funktionen og strukturen inden i et batteri, mens det er virksomt. Neutronsprengningsgruppen er tilknyttet den kommende spallationskilde ESS i Lund i Sverige, ligesom røntgengruppen er i gang med at udvikle en beamlinje, Danmax, ved synkrotronkilden, Max IV, sammesteds.



**Figur 1.** Et af Nanotekets røntgenapparater sat op til CT-skanning af fjerbold. Røntgenrøret sidder til venstre, og man aner katoden gløde orange. Bolden roteres, og man optager fx 200 projektioner fra forskellige vinkler. Disse behandles i computeren, og en 3D-rekonstruktion dannes.