

POLITECHNIKA WARSZAWSKA

WYDZIAŁ FIZYKI



Praca magisterska

# Badanie rozrzedzonego gazu Fermiego metodą Hartree-Focka-Bogolubowa w niezerowych temperaturach

Study of dilute Fermi gas using Hartree-Fock-Bogolyubov  
method in non-zero temperatures

Autor:

Tomasz Miller

Promotor:

Prof. dr hab. Piotr Magierski

Warszawa 2010

.....

Podpis Promotora

.....

Podpis Autora

# Streszczenie

Tematem pracy jest opis jednorodnego, rozrzedzonego gazu Fermiego w reżimie unitarnym uzyskany w ramach metody *Finite Temperature HFB* (FTHFB), stanowiącej uogólnienie przybliżenia Hartree-Focka-Bogolubowa na niezerowe temperatury.

Praca ta ma charakter teoretyczno-obliczeniowy.

Część teoretyczna zaczyna się od skonstruowania efektywnego potencjału oddziaływania międzycząstkowego. Zapostulowanym potencjałem jest prosty, deltapodobny potencjał oddziaływania kontaktowego poddany stosownej renormalizacji. Zostaje on dalej dookreślony w wyniku analizy zjawiska niskoenergetycznego rozpraszania fermionu na fermionie.

Tak otrzymany efektywny potencjał jest w dalszej części wykorzystany do zapisania *równań Hartree-Focka-Bogolubowa* (HFB) badanego układu, opisujących jego zachowanie w temperaturze zera bezwzględnego. W przedstawionej krok po kroku argumentacji, równania te z postaci abstrakcyjnej zostają sprowadzone do znanych z literatury równań: szczeliny energetycznej (*gap equation*) oraz stałej liczby cząstek (*number equation*). Matematycznie stanowią one nieliniowy układ dwóch równań z dwiema niewiadomymi. Wyprowadzony zostaje również wzór na całkowitą energię gazu.

Zwieńczeniem części teoretycznej jest uogólnienie powyższych rozważań na niezerową temperaturę  $T$ , dokonane w ramach tytułowej metody FTHFB. Przybliżone jest pokrótce wyprowadzenie tej metody, a stanowiące jej serce tzw. *równania FTHFB* zostają, dla badanego układu, sprowadzone do prostszej postaci. Tak jak poprzednio, jest to nieliniowy układ dwóch równań z dwiema niewiadomymi, którego szczególnym przypadkiem ( $T \rightarrow 0$ ) są równania HFB. Wyprowadzony jest także wzór na energię wewnętrzną gazu.

Część obliczeniowa niniejszej pracy polega na numerycznym rozwiązaniu równań FTHFB i dokonaniu na ich bazie analizy własności rozrzedzonego gazu Fermiego w reżimie unitarnym, ze szczególnym uwzględnieniem tzw. *granicy unitarnej*. Uzyskana jest pełna zgodność z wynikami równoważnych podejść średniopółowych. Obliczenia przeprowadzone zostały w środowisku *Mathematica* za pomocą specjalnie do tego celu napisanego zestawu instrukcji.

# Abstract

The aim of this work is to describe uniform, dilute Fermi gas in the unitary regime by means of the so called Finite Temperature HFB (FTHFB) method, which generalizes the Hartree-Fock-Bogolyubov approximation onto non-zero temperatures.

The work itself is of theoretical/computational character.

The theoretical part begins with the construction of an effective interparticle interaction potential. Namely, a simple delta-like contact potential is imposed and suitably renormalized. It is being fully specified by performing the fermion-fermion low energy scattering analysis.

Next, effective potential thus obtained is used in writing down *Hartree-Fock-Bogolyubov* (HFB) *equations* of the system in question, which govern its behavior in the absolute zero temperature. In the course of a careful, step-by-step argumentation the equations are then reduced from their abstract form to the form of the well-known: gap equation and number equation. Mathematically speaking, we are thus left with a non-linear system of two equations with two unknowns. Also, formula for the total energy of the gas is obtained.

Generalization of the above consideration onto a non-zero temperature  $T$ , achieved by means of *FTHFB method*, constitutes the consummation of the theoretical part. Having provided a brief derivation of the method, the crucial so called *FTHFB equations* of the studied system are given and then also reduced to a much simpler form. Just like above, they simplify to a non-linear system of two equations, whose special case ( $T \rightarrow 0$ ) are HFB equations. Moreover, formula for the inner energy of the gas is obtained.

The computational part of the work consists in solving the FTHFB equations numerically, and, basing on the solutions, in reviewing the physics of dilute Fermi gas at unitarity, with the emphasis given to the so called *unitary limit*. Full consistency of results with equivalent, mean-field approaches is achieved. Computations were done in the *Mathematica* environment with the specially written set of instructions.

# Spis treści

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Wiadomości wstępne</b>  | <b>7</b>  |
| 1.1      | Motywacja i plan pracy . . . . .   | 7         |
| 1.2      | Idea teorii efektywnej . . . . .   | 8         |
| 1.3      | Rozrzedzone gazy fermionowe . . . . .                                    | 9         |
| 1.4      | Formalizm i konwencje przyjęte w pracy . . . . .                         | 10        |
| <b>2</b> | <b>Oddziaływanie efektywne</b>   | <b>12</b> |
| 2.1      | Wstęp . . . . .  | 12        |
| 2.2      | Oddziaływanie efektywne . . . . .  | 13        |
| 2.3      | Rozpraszanie przy niskich energiach . . . . .                            | 15        |
| 2.3.1    | Równanie Schrödingera . . . . .  | 15        |
| 2.3.2    | Wyznaczenie amplitudy rozpraszania $f$ . . . . .                         | 17        |
| 2.3.3    | Uwzględnienie spinu . . . . .  | 21        |
| 2.4      | Wnioski. Ostateczna postać efektywnego potencjału oddziaływania. . . . . | 22        |
| <b>3</b> | <b>Metoda HFB</b>  | <b>23</b> |
| 3.1      | Uwagi wstępne . . . . .  | 23        |
| 3.1.1    | Notacja . . . . .  | 23        |
| 3.1.2    | Dyskretyzacja bazy pędowej . . . . .                                     | 24        |
| 3.1.3    | Uwagi na temat metody HFB . . . . .                                      | 25        |
| 3.2      | Symetrie badanego układu . . . . .                                       | 26        |
| 3.3      | Równania HFB dla rozrzedzonego gazu fermionów . . . . .                  | 28        |
| 3.3.1    | Antysymetryzowana macierz potencjału oddziaływania $\hat{V}$ . . . . .   | 28        |
| 3.3.2    | Postać równań HFB w dowolnej bazie jednocząstkowej . . . . .             | 28        |
| 3.3.3    | Macierze gęstości $\rho$ i $\kappa$ . . . . .                            | 30        |
| 3.3.4    | Jednocząstkowy potencjał średniopolowy $\Gamma$ . . . . .                | 32        |
| 3.3.5    | Potencjał korelacji par $\Delta$ . . . . .                               | 32        |
| 3.3.6    | Energia kinetyczna $T$ . . . . .   | 33        |
| 3.3.7    | Macierz energii jednokwazicząstkowych $E$ . . . . .                      | 33        |
| 3.3.8    | Pierwsze równanie HFB . . . . .  | 34        |
| 3.3.9    | Drugie równanie HFB . . . . .  | 35        |
| 3.3.10   | Wybór konwencji fazowej . . . . .  | 35        |
| 3.3.11   | Konsekwencje symetrii odwrócenia spinu . . . . .                         | 36        |
| 3.3.12   | Sprowadzenie równań HFB do układu dwóch równań . . . . .                 | 37        |
| 3.3.13   | Przejście graniczne $L \rightarrow +\infty$ . . . . .                    | 40        |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 3.3.14   | Symetria obrotowa i jej konsekwencje . . . . .                                    | 41        |
| 3.4      | Podsumowanie: rozwiązanie równań HFB oraz funkcjonal energii. . . . .             | 41        |
| <b>4</b> | <b>Uogólnienie metody HFB na <math>T &gt; 0</math> – metoda FTHFB</b>             | <b>46</b> |
| 4.1      | Metoda FTHFB . . . . .  | 46        |
| 4.2      | Równania FTHFB dla rozrzedzonego gazu fermionów . . . . .                         | 49        |
| 4.2.1    | Wybór bazy. Macierze $A$ i $B$ . . . . .  | 49        |
| 4.2.2    | Macierze gęstości $\rho$ i $\kappa$ . . . . .                                     | 50        |
| 4.2.3    | Potencjały $\Gamma$ i $\Delta$ . . . . .  | 50        |
| 4.2.4    | Równania FTHFB . . . . .  | 51        |
| 4.2.5    | Konsekwencje symetrii odwrócenia spinu . . . . .                                  | 52        |
| 4.2.6    | Srowadzenie równań FTHFB do układu dwóch równań . . . . .                         | 53        |
| 4.2.7    | Przejście graniczne $L \rightarrow +\infty$ . Symetria obrotowa. . . . .          | 56        |
| 4.3      | Podsumowanie: rozwiązanie równań FTHFB oraz funkcjonal energii. . . . .           | 56        |
| <b>5</b> | <b>Analiza numeryczna rozrzedzonego gazu Fermiego w przybliżeniu FTHFB</b>        | <b>61</b> |
| 5.1      | Uwagi techniczne . . . . .  | 62        |
| 5.1.1    | Układ jednostek i sposób prezentacji wyników . . . . .                            | 62        |
| 5.1.2    | Równania FTHFB w różnych przypadkach . . . . .                                    | 62        |
| 5.1.3    | Przybliżona postać wzoru (4.57) na $\epsilon_{\text{FTHFB}}$ . . . . .            | 64        |
| 5.2      | Stabilność wyników ze względu na koncentrację cząstek $n$ . . . . .               | 67        |
| 5.3      | Stabilność wyników ze względu na pęd obciążenia $k_c$ . . . . .                   | 67        |
| 5.4      | Termodynamika gazu Fermiego w granicy unitarnej . . . . .                         | 69        |
| 5.4.1    | Właściwości układu w stanie podstawowym oraz w niezerowych temperaturach. . . . . | 70        |
| 5.4.2    | Stabilność równowagi termodynamicznej . . . . .                                   | 74        |
| 5.5      | Poza granicą unitarną. Zależność od $1/a$ . . . . .                               | 77        |
| 5.6      | Podsumowanie . . . . .  | 80        |
| <b>6</b> | <b>Dodatek: Uzupełnienie matematyczno-programistyczne</b>                         | <b>82</b> |
| 6.1      | Obliczenie całki $I(\kappa, k_\alpha)$ . . . . .                                  | 82        |
| 6.2      | Zbieżność całek niewłaściwych . . . . .   | 83        |
| 6.3      | Najważniejsze bloki instrukcji . . . . .  | 88        |

# Rozdział 1

## Wiadomości wstępne

### 1.1 Motywacja i plan pracy

W ostatnich kilkunastu latach obserwuje się dynamiczny postęp w pułapkowaniu, chłodzeniu i badaniu rozrzedzonych gazów atomowych. Za umowny początek tego okresu można uważać pierwszą, przełomową obserwację zjawiska kondensacji Bosego-Einsteina (BEC) w wyniku schłodzenia atomów rubidu, przypadającą na rok 1995 [1, 2, 3].

Początkowo fizycy eksperymentalni koncentrowali się na gazach bozonowych, jednakże wkrótce ich uwaga oraz uwaga teoretyków objęła również układy atomów o statystyce Fermiego-Diraca [4, 5, 6]. Ich właściwości w niskich temperaturach są znacznie bogatsze, istotnie zależąc od siły oddziaływania międzyfermionowego, charakteryzowanego przez tzw. *długość rozpraszania*<sup>1</sup>  $a$  [9].

I tak, dla słabego oddziaływania przyciągającego ( $a \lesssim 0$ ) cząstki gazu łączą się w pary Coopera, a cały układ daje się z powodzeniem modelować za pomocą teorii nadprzewodnictwa Bardeena-Coopera-Schrieffera (BCS) [10]. Z kolei dla silnego oddziaływania przyciągającego ( $a \gtrsim 0$ ) poszczególne pary cząstek tworzą stany związane – dimery podlegające statystyce Bosego-Einsteina, a cały układ zachowuje się jak gaz bozonów [11]. Oba te reżimy, zwane odpowiednio reżimami: BCS i BEC, poddają się teoretycznemu opisowi metodami perturbacyjnymi [12].

Na pograniczu tych dwóch reżimów ( $1/a \approx 0$ ) znajduje się obszar przejściowy. W analizie teoretycznej rozrzedzonego gazu Fermiego w tym tzw. *reżimie unitarnym* metody perturbacyjne zawodzą, a na wiele ważkich pytań dotyczących tego reżimu wciąż nie ma odpowiedzi lub są one zgrubne [12].

Niniejsza praca pomyślana jest jako niezależne skonstruowanie prostej, średniopolowej teorii rozrzedzonego gazu fermionowego w reżimie unitarnym ze szczególnym uwzględnieniem *granicy unitarnej*, tj.  $1/a = 0$ . Konstrukcja ta bazuje na powszechnie stosowanym w fizyce niskich energii podejściu efektywnym, a w dalszej części na metodzie Hartree-Focka-Bogolubowa w ujęciu Dobaczewskiego [13] oraz jej uogólnienia na niezerowe temperatury w ujęciu Goodmana [14].

---

<sup>1</sup>Por. formalną definicję rozpraszania w [7] bądź [8].

Formalnie, teoria ta dla  $T = 0$  jest równoważna oryginalnemu podejściu Leggetta [9], a dla temperatur niezerowych – średniopolowej teorii, w zwarty sposób przedstawionej np. w [15] w rozdziałach 3 i 3.1.

Plan pracy jest następujący.

We wstępie przybliżona zostaje idea teorii efektywnej oraz w kilku zdaniach zaprezentowane są podstawowe właściwości rozrzedzonych gazów Fermiego. Rozdział 2 zawiera konstrukcję efektywnego, zrenormalizowanego potencjału oddziaływania międzyfermionowego. Potencjał ten zostaje wykorzystany w Rozdziale 3 do zapisania tzw. *równań HFB* badanego układu, stanowiących jego przybliżony opis w temperaturze  $T = 0$ . Równania te w wyniku drobiazgowej argumentacji zostają sprowadzone z postaci ogólnej do znacznie prostszego, nieliniowego układu dwóch równań z dwiema niewiadomymi. W Rozdziale 4 dotychczasowe rezultaty zostają uogólnione na przypadek niezerowych temperatur – zostają zapisane (i sprowadzone do prostszej postaci) tzw. *równania FTHFB* badanego układu. Rozdział 5 stanowi sprawozdanie z numerycznej analizy rozwiązań tych równań, wzbogacone o ich interpretację fizyczną. Na końcu, po podsumowaniu, znajduje się Dodatek zawierający uzupełnienie matematyczne oraz programistyczne – Rozdział 6.

## 1.2 Idea teorii efektywnej

W latach 40. XX w. Bethe zauważył, że zjawisko rozpraszania nukleonu na nukleonie w granicy niskoenergetycznej (10–20 MeV) można opisać za pomocą zaledwie dwu liczbowych parametrów, bez konieczności dokładnej znajomości potencjału oddziaływania [16].

Od tego czasu tzw. *teorie efektywne* były zawsze obecne w fizyce niskich energii, napędzając jej postęp. Ich idea stanowi rozwinięcie oryginalnego założenia Bethego. Stanowi ona mianowicie, iż: *dynamika procesów niskoenergetycznych daje się opisać niezależnie od szczegółów dynamiki tych procesów w wysokich energiach* [17]. Korzyść z takiego podejścia polega na tym, że konstrukcja niskoenergetycznej teorii efektywnej jest prostsza – teoria taka zawiera zazwyczaj niewielką liczbę stopni swobody (np. równą 2 we wspomnianej wyżej pracy Bethego), nie wymagając znajomości dokładnej postaci oddziaływania.

Za ilustrację skuteczności efektywnego opisu niskoenergetycznego rozpraszania niech służy wyczerpująca analiza wyników przeszło 4000 eksperymentów, w których rozpraszano nukleony na nukleonach przy energiach nieprzekraczających 350 MeV [18]. W tym wypadku okazało się, że wszystkie te wyniki można odtworzyć, opisując zjawisko rozpraszania za pomocą pojedynczego zestawu przesunięć fazowych  $\delta_l$ .

Właśnie taka „efektywna” strategia obrona jest w niniejszej pracy. Zakłada się w niej mianowicie, że jedynymi oddziaływaniami w rozrzedzonym gazie Fermiego są binarne, niskoenergetyczne zderzenia fermion-fermion. Zostaje przyjęte, iż amplituda rozpraszania w funkcji wektora falowego cząstki rozpraszanej wyraża się wzorem [7]:

$$f(k) \stackrel{k \rightarrow 0}{=} \frac{1}{-\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_{\text{eff}}k^2 - ik} \quad (1.1)$$



a zatem jest zdeterminowana przez dwa parametry:  $a$  i  $r_{\text{eff}}$ .

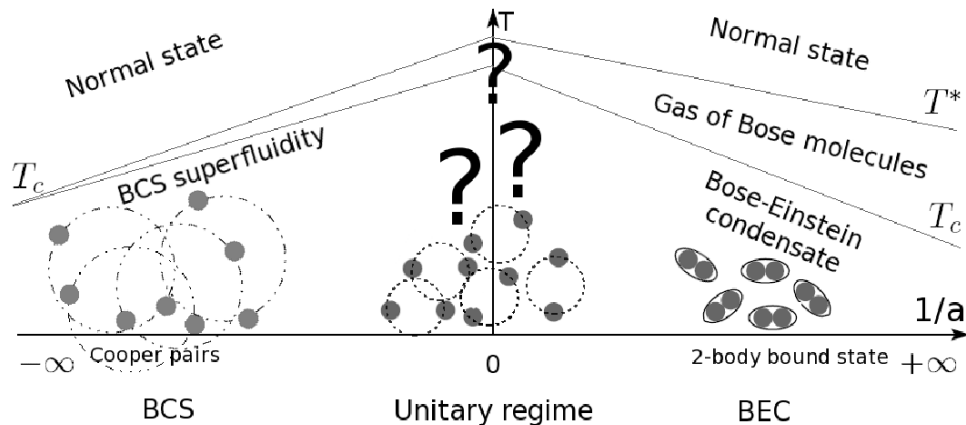
Równocześnie zapostulowany zostaje stosowny, efektywny potencjał oddziaływania, odtwarzający w granicy niskich energii wartości tych dwóch parametrów. Wszystko to stanowi treść Rozdziału 2.

### 1.3 Rozrzedzone gazy fermionowe

Od czasu gdy Eagles [19], a wkrótce po nim Leggett [9] zaczęli rozważać, w jaki sposób właściwości rozrzedzonego gazu fermionów zmieniają się z siłą oddziaływania międzycząstkowego, wiedza na ten temat znacznie się pogłębiła, zarówno od strony teoretycznej, jak i doświadczalnej. Nie miejsce tu nawet na pobieżny przegląd osiągnięć w tej dziedzinie, wyczerpująco przedstawiony np. w [12]. Zamiast tego, przedstawimy pokrótce ogólne fakty dotyczące fizyki rozrzedzonych gazów Fermiego, posilkując się [12, 20].

Jak już wspomniano w podrozdziale 1.1 i jak dokładnie zostanie to uzasadnione za pomocą podejścia efektywnego w Rozdziale 2, dla niskich koncentracji fermionów oraz w niskich temperaturach siła oddziaływania międzycząstkowego może być scharakteryzowana za pomocą jednej liczby: *długości rozpraszania*  $a$ , jakkolwiek często wygodniej posługiwać się jej odwrotnością<sup>2</sup>:  $1/a$ .

Zależność właściwości rozrzedzonego gazu fermionów od temperatury  $T$  oraz parametru  $1/a$  wygodnie przedstawić za pomocą następującego diagramu:



Rysunek 1.1: Diagram fazowy rozrzedzonej materii fermionowej.

Na diagramie schematycznie przedstawiono:

- **Reżim BCS** ( $1/a \ll 0$ ), w którym siła oddziaływania międzyfermionowego jest słaba i przyciągająca. Układ w tym reżimie daje się opisać za pomocą teorii nadprzewodnictwa BCS, z której wynika m.in., iż poniżej pewnej temperatury krytycznej  $T_c$  energetycznie korzystne staje się utworzenie przez cząstki gazu par Coopera, w wyniku czego staje się on nadprzewodnikiem (lub nadcieczą w przypadku gdy cząstki gazu są nienaładowane);

<sup>2</sup>To właśnie ona pojawia się w mianowniku wzoru (1.1).

- **Reżim BEC** ( $1/a \gg 0$ ), w którym siła oddziaływania międzyfermionowego jest silna i przyciągająca. Wskutek tego oddziaływania, poniżej charakterystycznej temperatury oznaczonej na diagramie przez  $T^*$  pojawiają się dwufermionowe stany związane (dimery) podlegające, jako cząstki złożone z parzystej liczby fermionów, statystyce Bosego-Einsteina. Taki układ dimerów daje się z powodzeniem opisać jako gaz oddziałujących bozonów. Efektywnie, siła oddziaływania międzybozonowego jest słaba i odpychająca, w związku z czym układ poniżej temperatury krytycznej  $T_c$  przejawia zjawisko kondensacji Bosego-Einsteina;
- **Reżim unitarny** ( $1/a \approx 0$ ), w którym gaz jest jednocześnie rozrzedzony i silnie oddziałujący. Jest to obszar przejściowy między reżimami BEC i BCS, w którym pary fermionów są na granicy utworzenia (płytkiego) stanu związanego. Jak wynika z modeli wykraczających poza przedstawione w tej pracy przybliżenie średniopolewe, tak jak w reżimie BEC, tak i w tym reżimie można wyróżnić dwie charakterystyczne temperatury.

Szczególnie interesującym przypadkiem jest tzw. *granica unitarna*, odpowiadająca:  $1/a = 0$ , co przekłada się na nieskończoną długość rozpraszania. W takiej sytuacji opisująca binarne oddziaływanie fermion-fermion amplituda rozpraszania (1.1) przyjmuje (dla  $k \ll 1/r_{\text{eff}}$ ) uniwersalną postać:  $f(k) = i/k$ . Co więcej, jedyna charakterystyczna skala długości w układzie jest zadana przez jego pęd Fermiego.

Jedną z konsekwencji „uniwersalności” rozrzedzonego gazu Fermiego w granicy unitarnej jest szczególnie prosta, uniwersalna postać funkcji termodynamicznych, w tym energii wewnętrznej  $E$  [21]:

$$E = \frac{3}{5} E_F N \xi(T/T_F) \quad (1.2)$$

gdzie:  $E_F$  oznacza energię Fermiego,  $T_F := E_F/k_B$  to temperatura Fermiego,  $N$  stanowi liczbę cząstek w układzie, natomiast  $\xi$  jest pewną funkcją.

Do tego faktu wrócimy jeszcze w podrozdziale 5.4.2.

Nadmieńmy na koniec, iż ze względu na swoją „uniwersalność”, zrozumienie właściwości i zachowania tego konkretnego kwantowego układu wielu ciał wiązałoby się z postępem także w rozumieniu takich systemów jak: nadprzewodniki wysokotemperaturowe, zewnętrzne warstwy gwiazd neutronowych i ogólnie materia neutronowa, a także plazma kwarkowo-gluonowa.

## 1.4 Formalizm i konwencje przyjęte w pracy

W niniejszej pracy posługiwać się będziemy formalizmem drugiej kwantyzacji. Przestrzenią stanów jest przestrzeń Focka dla fermionów, a wielkościom dynamicznym odpowiadają operatory liniowe działające w tej przestrzeni. Jak wiadomo<sup>3</sup>, każdy operator można wyrazić za pomocą ważonej sumy iloczynów operatorów kreacji  $a_\mu$  i anihilacji  $a_\mu^+$  fermionu w jednocząstkowych stanach kwantowych  $|\mu\rangle$ , przy czym wagami są odpowiednie elementy macierzowe tego operatora.

---

<sup>3</sup>Por. [13, 22].

W szczególności, dla operatora  $N$ -cząstkowego  $\hat{X}$ :

$$\hat{X} = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_N, \\ \mu'_1, \dots, \mu'_N}} \langle \mu'_1 \dots \mu'_N | \hat{X} | \mu_1 \dots \mu_N \rangle a_{\mu'_1}^+ \dots a_{\mu'_N}^+ a_{\mu_N} \dots a_{\mu_1} \quad (1.3)$$

W pracy tej przyjmujemy również następującą konwencję nazewnictwa. Otóż wektor falowy  $\mathbf{k}$  będziemy konsekwentnie nazywać *pędem*, a samego wektora pędu  $\mathbf{p}$  nie będziemy używać. Obie te wielkości są do siebie proporcjonalne:  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ , toteż takie nazewnictwo nie powinno prowadzić do nieporozumień. Tym sposobem unikniemy również kolizji oznaczeń długości wektora pędu  $p$  i ciśnienia.

Stałą Boltzmana oznaczamy będziemy przez  $k_B$ .

# Rozdział 2

## Oddziaływanie efektywne

### 2.1 Wstęp

W pracy rozważać będziemy jednorodny, rozrzedzony gaz oddziałujących fermionów o spinie  $\frac{1}{2}$  i masie  $m$ , opisany hamiltonianem stanowiącym sumę jednocząstkowego operatora energii kinetycznej  $\hat{T}$  oraz dwucząstkowego operatora potencjału oddziaływania międzycząstkowego  $\hat{V}$ :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (2.1)$$

gdzie potencjał  $\hat{V}$  odznacza się pewnym *skończonym* zasięgiem  $r_0$ .

Definicję rozrzedzoneści przyjmujemy tu za [12]. Stanowi ona, iż gaz Fermiego jest *rozrzedzony*, gdy spełnione są nierówności:

$$r_0 \ll \lambda_T \quad \text{oraz} \quad r_0 \ll k_F^{-1} \quad (2.2)$$

gdzie:  $\lambda_T := \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$  to termiczna długość fali de Broglie'a w temperaturze  $T$ , natomiast  $k_F$  oznacza pęd<sup>1</sup> Fermiego układu.

Pierwsze pytanie, przed jakim stajemy, dotyczy postaci  $\hat{V}$ . Znajomość ścisłej postaci potencjału oddziaływania dla atomów gazu fermionowego nie jest nam potrzebna, albowiem ograniczając się do reżimu niskich energii, możemy posługiwać się teorią efektywną (por. Rozdział 1). Teoria efektywna pozwala opisywać oddziaływanie w terminach amplitudy rozpraszania  $f$  i przesunięć fazowych  $\delta_l$  zamiast konkretnej postaci potencjału.

W granicy niskiej temperatury rozrzedzonego gazu główny wkład do amplitudy rozpraszania pochodzi od fali parcjalnej  $s$ . W związku z tym amplituda rozpraszania przyjmuje szczególnie prostą, sferycznie symetryczną postać, dla zadanego oddziaływania zależąc jedynie od wartości pędu cząstki rozpraszanej  $k_\alpha$  [7]:

$$f(k_\alpha) \stackrel{k_\alpha \rightarrow 0}{=} \frac{1}{-\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_{\text{eff}}k_\alpha^2 - ik_\alpha} \quad (2.3)$$

---

<sup>1</sup>Należy pamiętać o konwencji nazewnictwa, jaką wprowadziliśmy w podrozdziale 1.4.

gdzie parametry  $a$  i  $r_{\text{eff}}$  o wymiarach długości nazywane są odpowiednio: *długością rozpraszania* oraz *zasięgiem efektywnym*. Teoria oddziaływania efektywnego stanowi, że *każdy* potencjał  $\hat{V}$ , który w granicy niskich energii daje poprawne wartości parametrów  $a$  oraz  $r_{\text{eff}}$  we wzorze (2.3), pozwala opisać fizykę rozrzedzonego gazu Fermiego.

Należy zatem zapostulować pewien efektywny potencjał oddziaływania  $\hat{V}$  o zasięgu spełniającym definicję rozrzedzonego gazu (2.2), który to potencjał w wyniku analizy rozpraszania fermion-fermion implikować będzie (w granicy niskiego pędu względnego cząstek) amplitudę rozpraszania (2.3) o zadanych wartościach parametrów  $a$  oraz  $r_{\text{eff}}$ . Jest to przedmiotem następných dwóch podrozdziałów.

## 2.2 Oddziaływanie efektywne

Najprostszym dwuczłonowym potencjałem oddziaływania międzycząstkowego, jaki możemy zapostulować, jest potencjał oddziaływania kontaktowego, dany wzorem:

$$\hat{V} := -g \int d^3\mathbf{r} a_{\uparrow}^+(\mathbf{r}) a_{\downarrow}^+(\mathbf{r}) a_{\downarrow}(\mathbf{r}) a_{\uparrow}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Stała sprzężenia  $g$  jest w tym momencie dowolna. Znak minus jest pewną przyjętą przez nas konwencją. W konsekwencji, dodatniej wartości  $g$  odpowiada oddziaływanie przyciągające.

„Kontaktowość” powyższego potencjału bierze się z faktu, że para cząstek musi znaleźć się w tym samym punkcie, aby nastąpiło między nimi oddziaływanie (oddziaływanie to ma zasięg punktowy). W świetle tego wymogu oraz na mocy zakazu Pauliego zrozumiałe jest, że oddziałujące w ten sposób fermiony muszą mieć przeciwne spiny.

Potencjał ten można zadać równoważnie przez następujące elementy macierzowe w bazie położeniowej:

$$\langle \mathbf{r}'_1 \lambda'_1 \mathbf{r}'_2 \lambda'_2 | \hat{V} | \mathbf{r}_1 \lambda_1 \mathbf{r}_2 \lambda_2 \rangle = -\frac{g}{2} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \quad (2.5)$$

Taki zapis elementu macierzowego  $\hat{V}$  jest jednym z wielu równoważnych (ze względu na charakter funkcji  $\delta$ ). Powyższy pozwala dostrzec, iż rozważany potencjał ma, obok punktowego zasięgu oddziaływania, również punktowy zasięg nielokalności.

Z pewnych względów, które staną się jasne w dalszej części tego podrozdziału, zapiszmy jeszcze ten element macierzowy nieco inaczej:

$$\langle \mathbf{r}'_1 \lambda'_1 \mathbf{r}'_2 \lambda'_2 | \hat{V} | \mathbf{r}_1 \lambda_1 \mathbf{r}_2 \lambda_2 \rangle = -4g \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \quad (2.6)$$

Znaczenie trzeciej z pięciu funkcji  $\delta$  w powyższym iloczynie można wyrazić mówiąc, że potencjał kontaktowy zachowuje położenie środka masy pary oddziałujących cząstek. Innymi słowy, potencjał jest lokalny ze względu na środek masy.

Niestety, powyższy potencjał jako taki nie nadaje się do naszych rozważań. Dobrze znany jest fakt, że potencjał kontaktowy nie powoduje rozpraszania cząstka-cząstka (por. [23]).

Istnieje również drugi problem, który najlepiej jest sformułować wyrażając element macierzowy  $\hat{V}$  w bazie pędowej:

$$\langle \mathbf{k}'_1 \lambda'_1 \mathbf{k}'_2 \lambda'_2 | \hat{V} | \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle = -\frac{g}{2(2\pi)^3} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \quad (2.7)$$

Jak widać, w przestrzeni pędów oddziaływanie kontaktowe zapewnia jedynie zachowywanie się całkowitego pędu pary oddziałujących cząstek. W szczególności, nie nakłada żadnego górnego ograniczenia na *wartości* pędów oddziałujących cząstek. Okazuje się, że bardzo szybko prowadzi to do pojawienia się w obliczeniach niefizycznych nieskończoności<sup>2</sup>. Do ilustracji tego faktu wrócimy jeszcze w dalszej części tego podrozdziału.

Pokażemy, że obu problemów można uniknąć, wprowadzając tzw. *pęd obciążenia*  $k_c$ . Procedurę tą nazywać będziemy *renormalizacją potencjału kontaktowego*. Formalnie, należy przemnożyć każdy element macierzowy  $\hat{V}$  w bazie pędowej (2.7) przez pewną poprawkę zależną od (na razie dowolnego) parametru  $k_c$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'_1 \lambda'_1 \mathbf{k}'_2 \lambda'_2 | \hat{V}_{k_c} | \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle &= -\frac{g}{2(2\pi)^3} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \times \\ &\times \mathbb{I}_{B(0, k_c)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \mathbb{I}_{B(0, k_c)}(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \end{aligned} \quad (2.8)$$

gdzie  $\mathbb{I}_X$  oznacza tzw. *funkcję charakterystyczną* zbioru  $X$ . Jest to funkcja równa 1 na zbiorze  $X$  oraz 0 poza nim. Z kolei zapis  $B(\mathbf{a}, r)$  oznacza kulę otwartą w  $\mathbb{R}^3$  o środku w punkcie  $\mathbf{a}$  i promieniu  $r$ . Aby rozwiązać wszelkie wątpliwości, zapiszmy funkcję  $\mathbb{I}_{B(0, k_c)}$  *explicité*:

$$\mathbb{I}_{B(0, k_c)}(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1 & \text{dla } k < k_c, \\ 0 & \text{dla } k \geq k_c. \end{cases} \quad (2.9)$$

Kule w przestrzeni pędów będziemy nazywać *kulami pędowymi*.

Aby przekonać się, jak zmiana ta wpływa na kształt potencjału, zapiszmy element macierzowy  $\hat{V}_{k_c}$  w bazie położeniowej:

$$\langle \mathbf{r}'_1 \lambda'_1 \mathbf{r}'_2 \lambda'_2 | \hat{V}_{k_c} | \mathbf{r}_1 \lambda_1 \mathbf{r}_2 \lambda_2 \rangle = -4g \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) d_{k_c/2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d_{k_c/2}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \quad (2.10)$$

gdzie wprowadzono funkcję zwaną *niepełną deltą Diraca* zdefiniowaną jako całka<sup>3</sup>:

$$d_\kappa(\mathbf{r}) := (2\pi)^{-3} \int_{k < \kappa} d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.11)$$

Wzór (2.10) ma identyczną strukturę jak (2.5) – ten pierwszy odróżnia się jedynie obecnością zdefiniowanej powyżej niepełnej delty Diraca. Rzecz jasna, w granicy  $k_c \rightarrow \infty$  wzór (2.10) formalnie przechodzi w (2.5).

Jak widać,  $\hat{V}_{k_c}$  ma niezerowy zasięg oddziaływania – zasięg ten jest dlań rzędu  $k_c^{-1}$ . Może się wydawać, iż sprawi to w szczególności, że fermiony o identycznych spinach będą ze sobą oddziaływać. Jak się jednak przekonamy w toku analizy rozproseniowej naszego potencjału, wcale tak nie będzie.

<sup>2</sup>Na określenie tego zjawiska używa się historycznego, pochodzącego od Ehrenfesta terminu: *katastrofa w nadfiolecie* [12].

<sup>3</sup>Całkę tę można obliczyć:  $d_\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2 r^3} (\sin \kappa r - \kappa r \cos \kappa r)$ , przedłużona w sposób ciągły do punktu  $\mathbf{r} = 0$ .

Rozrzedzoność gazu nakłada dwa warunki na zasięg oddziaływania (por. podrozdział 2.1). Drugi z nich, zapisany w terminach  $k_c$ , przyjmie prostą postać:

$$k_c \gg k_F \quad (2.12)$$

Spełnienie tego warunku w symulacji będzie dokładnie przedyskutowane w części dotyczącej wyników (Rozdział 5). Wcześniej zostanie on jeszcze nieco wzmocniony (Rozdziały 3 i 4.2).

Potencjał  $\hat{V}_{k_c}$  ma również niezerowy zasięg nielokalności. Co ciekawe, jest jednakże lokalny względem środka masy, podobnie jak przed renormalizacją (por. (2.5)). Nielokalność  $\hat{V}_{k_c}$  nie jest problematyczna, o ile jej zasięg, podobnie jak zasięg oddziaływania, jest „mały”. Ponieważ przy  $k_c \rightarrow \infty$  potencjał staje się lokalny, uzasadnione jest przyjąć, że nielokalność staje się efektywnie nieistotna, o ile pęd obciążenia jest wystarczająco duży. Prowadzi to ponownie do warunku (2.12).

Z tak zapostulowanym potencjałem efektywnym, możemy przejść do jego analizy rozproszeniowej, która pozwoli powiązać parametry  $g$  oraz  $k_c$  z zadanymi parametrami  $a$  oraz  $r_{\text{eff}}$ .

## 2.3 Rozpraszanie przy niskich energiach

W niniejszym rozdziale wiele wzorów zostało zaczerpniętych z [7]. Odnośniki do nich będą mieć formę (S <nr wzoru w [7]>).

### 2.3.1 Równanie Schrödingera

Punktem wyjścia naszych rozważań będzie równanie Schrödingera opisujące układ dwóch oddziałujących fermionów o spinie  $\frac{1}{2}$  zapisane w obrazie Schrödingera:

$$(\hat{T} + \hat{V}_{k_c})|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle \quad (2.13)$$

Zapiszmy elementy macierzowe obu pojawiających się powyżej operatorów w bazie pędowej. Operator całkowitej energii kinetycznej układu jest w tej bazie diagonalny:

$$\langle \mathbf{k}'_1 \lambda'_1 \mathbf{k}'_2 \lambda'_2 | \hat{T} | \mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'_2) (k_1^2 + k_2^2), \quad (2.14)$$

natomiast element macierzowy operatora  $\hat{V}_{k_c}$  wyraża się wzorem (2.8).

Jak wiadomo<sup>4</sup>, równanie tego typu można rozseparować w układzie środka masy pary fermionów. W bazie pędowej odpowiada to przejściu ze zmiennych  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  do zmiennych  $\mathbf{k}_M, \mathbf{k}_w$  zdefiniowanych poprzez:

$$\mathbf{k}_M = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \quad (2.15)$$

$$\mathbf{k}_w = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \quad (2.16)$$

---

<sup>4</sup>Patrz np. §16 w [7].

Pierwsza z powyższych zmiennych pędowych ma więc sens całkowitego pędu układu, natomiast druga – (połowy) względnego pędu jednego z fermionów względem drugiego. Można się łatwo przekonać, że transformacja taka jest unitarna.

Bezpośrednim podstawieniem otrzymamy, że w tej nowej bazie operator  $\hat{T}$  również będzie diagonalny:

$$\langle \mathbf{k}'_M \mathbf{k}'_w \lambda'_1 \lambda'_2 | \hat{T} | \mathbf{k}_M \mathbf{k}_w \lambda_1 \lambda_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{k}_M - \mathbf{k}'_M) \delta(\mathbf{k}_w - \mathbf{k}'_w) \left( \frac{1}{4} k_M^2 + k_w^2 \right) \quad (2.17)$$

Co więcej, w bazie tej nieco uprości się operator  $\hat{V}_{k_c}$ , okazując się diagonalny w zmiennej  $\mathbf{k}_M$  (czego należało się spodziewać, skoro zauważyliśmy uprzednio, że nasz potencjał zachowuje całkowity pęd):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'_M \mathbf{k}'_w \lambda'_1 \lambda'_2 | \hat{V}_{k_c} | \mathbf{k}_M \mathbf{k}_w \lambda_1 \lambda_2 \rangle &= -\frac{g}{2(2\pi)^3} \delta_{\lambda_1 \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} \delta(\mathbf{k}_M - \mathbf{k}'_M) \times \\ &\times \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}_w) \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}'_w) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Rozwijając w naszej bazie stan układu:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int d^3 \mathbf{k}_M d^3 \mathbf{k}_w F_{\lambda_1 \lambda_2}(t, \mathbf{k}_M, \mathbf{k}_w) |\mathbf{k}_M \mathbf{k}_w \lambda_1 \lambda_2\rangle \quad (2.19)$$

i podstawiając (2.17)–(2.19) do równania Schrödingera (2.13), otrzymamy:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{1}{4} k_M^2 + k_w^2 \right) F_{\lambda_1 \lambda_2}(t, \mathbf{k}_M, \mathbf{k}_w) - \frac{g}{2(2\pi)^3} \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}_w) \int_{k_w < k_c/2} d^3 \mathbf{k}'_w F_{\lambda_1 \lambda_2}(t, \mathbf{k}_M, \mathbf{k}'_w) &= (2.20) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} F_{\lambda_1 \lambda_2}(t, \mathbf{k}_M, \mathbf{k}'_w) \end{aligned}$$

Kluczem do rozwiązania powyższego równania jest następujące podstawienie:

$$F_{\lambda_1 \lambda_2}(t, \mathbf{k}_M, \mathbf{k}_w) = \psi_w(\mathbf{k}_w) \psi_M(\mathbf{k}_M, t) \quad (2.21)$$

Dzięki niemu, równanie (2.20) rozseparuje się na dwa:

$$\frac{\hbar^2}{m} k_w^2 \psi_w(\mathbf{k}_w) - \frac{g}{2(2\pi)^3} \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}_w) \int_{k_w < k_c/2} d^3 \mathbf{k}'_w \psi_w(\mathbf{k}'_w) = E_w \psi_w(\mathbf{k}_w), \quad (2.22)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_M(\mathbf{k}_M, t) = \left( \frac{\hbar^2}{4m} k_M^2 + E_w \right) \psi_M(\mathbf{k}_M, t) \quad (2.23)$$

Drugie z powyższych równań można rozwiązać natychmiast:

$$\psi_M(\mathbf{k}_M, t) = C \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{4m} k_M^2 + E_w \right) t\right) \quad (2.24)$$

gdzie  $C$  jest stałą normalizacyjną<sup>5</sup>.

Równanie (2.22) formalnie ma postać równania Schrödingera bez czasu opisującego ruch bezspinowej cząstki o masie  $\mu := \frac{1}{2}m$  i energii  $E_w$  poruszającej się w zewnętrznym, nielokalnym potencjale  $\hat{V}_w$  o elemencie macierzowym:

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{V}_w | \mathbf{k} \rangle = -\frac{g}{2(2\pi)^3} \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}) \mathbb{I}_{B(0, k_c/2)}(\mathbf{k}') \quad (2.25)$$

Tym samym, analiza rozproszeniowa fermionu na fermionie zostaje sprowadzona do analizy rozpraszania cząstki w zewnętrznym potencjale.

<sup>5</sup>Matematycznie rzecz biorąc,  $C$  może być funkcją  $\mathbf{k}_M$ , jednakże w naszych rozważaniach nie jest to istotne.



### 2.3.2 Wyznaczenie amplitudy rozpraszania $f$

Dla uproszczenia wzorów w dalszej analizie rozważymy potencjał o elemencie macierzyowym postaci:

$$\langle \mathbf{k}' | \hat{V}_w | \mathbf{k} \rangle = -\gamma \mathbb{I}_{B(0,\kappa)}(\mathbf{k}) \mathbb{I}_{B(0,\kappa)}(\mathbf{k}') \quad (2.26)$$

i dopiero na samym końcu, już po uwzględnieniu spinu, dokonamy podstawień:  $\mu \mapsto \frac{m}{2}$ ,  $\kappa \mapsto \frac{k_c}{2}$ ,  $\gamma \mapsto \frac{g}{2(2\pi)^3}$ . Zauważmy, że potencjał  $\hat{V}_w$  jest rzeczywisty i sferycznie symetryczny.

Obliczymy obecnie amplitudę rozpraszania  $f$  na potencjale  $\hat{V}_w$ .

Jako że poruszamy się w obrębie niskoenergetycznej teorii efektywnej, zakładamy, że główny wkład do rozpraszania pochodzi od fali  $s$ , w związku z czym  $f$  nie będzie zależeć od kierunku rozproszenia – będzie ono jedynie funkcją wartości pędu  $k_\alpha$  cząstki rozpraszanej.

W rozważanym przypadku, w celu obliczenia  $f$  najwygodniej posłużyć się formalizmem macierzy  $T$  (por. [7, 8]). Wzór (S 37.21) stanowi, iż:

$$f(k_\alpha) = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}'_\alpha | T | \mathbf{k}_\alpha \rangle \quad (2.27)$$

gdzie  $|\mathbf{k}'_\alpha| = |\mathbf{k}_\alpha| = k_\alpha$ .

Ze wzoru (S 37.36) wynika, że macierz  $T$  jest diagonalna w bazie  $|klm\rangle$  stanów własnych operatora momentu pędu i to w tej bazie wygodnie jest obliczyć jej element macierzyowy. Aby następnie otrzymać  $\langle \mathbf{k}'_\alpha | T | \mathbf{k}_\alpha \rangle$  potrzebne we wzorze (2.27), będzie wystarczyło dokonać transformacji:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'_\alpha | T | \mathbf{k}_\alpha \rangle &= \langle k_\alpha \phi' \theta' | T | k_\alpha \phi \theta \rangle = \sum_{lm'l'm'} \langle \phi' \theta' | l' m' \rangle \langle k_\alpha l' m' | T | k_\alpha l m \rangle \langle l m | \phi \theta \rangle = \\ &= \sum_{lm} \langle \phi' \theta' | l m \rangle \langle k_\alpha l m | T | k_\alpha l m \rangle \langle l m | \phi \theta \rangle = \sum_{lm} Y_{lm}(\phi', \theta') Y_{lm}^*(\phi, \theta) \langle k_\alpha l m | T | k_\alpha l m \rangle \end{aligned} \quad (2.28)$$

gdzie w trzecim przejściu skorzystano z diagonalności  $T$  w bazie  $|klm\rangle$ , a w czwartym – z postaci odpowiedniej macierzy transformacji (jej wyrazami są wartości stosownych harmonik sferycznych<sup>6</sup>).

Widzimy, że wystarczy teraz obliczyć element diagonalny macierzy  $T$  w bazie  $|klm\rangle$ .

Definicja macierzy  $T$ , wprowadzana zazwyczaj (por. [7, 8]) w kontekście równania Lippmanna-Schwingera, przybiera (dla naszego potencjału rozproszeniowego) formę następującego operatorowego równania samozgodnego:

$$T = \hat{V}_w + \frac{1}{\hbar} \hat{V}_w G_{0\alpha}^+ T \quad (2.29)$$

gdzie  $G_{0\alpha}^+$  to propagator cząstki swobodnej o energii  $\hbar\omega_\alpha$ . W rozważanym przypadku rozpraszania elastycznego cząstki o masie  $\mu$  i pędzie  $k_\alpha$  energia ta będzie oczywiście równa  $\hbar^2 k_\alpha^2 / 2\mu$ . Zwyczajowo nie opatruje się daszkami ani macierzy  $T$ , ani propagatora, jakkolwiek obiekty te mają charakter operatorowy.

<sup>6</sup>Por. (S 37.32) oraz Rozdział 5. w [24].

Formalnym rozwiązaniem powyższego równania jest tzw. *szereg Bohra* [8]:

$$T := \hat{V}_w + \frac{1}{\hbar} \hat{V}_w G_{0\alpha}^+ \hat{V}_w + \frac{1}{\hbar^2} \hat{V}_w G_{0\alpha}^+ \hat{V}_w G_{0\alpha}^+ \hat{V}_w + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{B}_n \quad (2.30)$$

gdzie  $n$ -ty wyraz Bohra wyraża się wzorem  $\hat{B}_n := \left(\frac{1}{\hbar}\right)^n \hat{V}_w (G_{0\alpha}^+ \hat{V}_w)^n$ .

Aby więc znaleźć  $\langle k_\alpha l m | T | k_\alpha l m \rangle$ , potrzeba wpiery znaleźć macierze operatorów  $G_{0\alpha}^+$  i  $\hat{V}_w$  (najlepiej w tej samej bazie), z ich iloczynów otrzymać macierze operatorów  $\hat{B}_n$  dla poszczególnych  $n$ , a na końcu wysumować je po  $n$ . Co zaskakujące, w przypadku rozważanego oddziaływania wymienione powyżej obliczenia dają się przeprowadzić w sposób ścisły.

Jak wynika z (S 37.18), element macierzowy propagatora  $G_{0\alpha}^+$  cząstki swobodnej o energii  $\hbar\omega_\alpha$  ma postać:

$$\langle k' l' m' | G_{0\alpha}^+ | k l m \rangle = \frac{1}{\omega_\alpha - \omega(k) + i\varepsilon} \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (2.31)$$

gdzie  $\varepsilon$  należy traktować jako infinitesimalną, dodatnią liczbę rzeczywistą.

W rozważanym przypadku relacja dyspersyjna ma oczywiście postać  $\omega(k) = \hbar k^2 / 2\mu$ , toteż powyższy wzór można zapisać w postaci:

$$\langle k' l' m' | G_{0\alpha}^+ | k l m \rangle = \frac{2\mu}{\hbar} \frac{1}{k_\alpha^2 - k^2 + i\varepsilon} \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (2.32)$$

Propagator jest więc w tej bazie diagonalny. To zrozumiałe, albowiem w ruchu swobodnym zachowany jest zarówno pęd, jak i moment pędu oraz rzut tego ostatniego na oś kwantyzacji. Mniej oczywista jest postać potencjału  $\hat{V}_w$  w tej bazie. Można ją obliczyć dokonując odpowiedniej transformacji bazy  $|\mathbf{k}\rangle$ , w której element macierzowy  $\hat{V}_w$  dany jest wzorem (2.26):

$$\begin{aligned} \langle k' l' m' | \hat{V}_w | k l m \rangle &= \int d\Omega' d\Omega \langle l' m' | \phi' \theta' \rangle \langle k' \phi' \theta' | \hat{V}_w | k \phi \theta \rangle \langle \phi \theta | l m \rangle = \\ &= \int d\Omega' d\Omega Y_{l'm'}^*(\phi', \theta') Y_{lm}(\phi, \theta) \langle \mathbf{k}' | \hat{V}_w | \mathbf{k} \rangle = \\ &= -\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k') \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k) \int d\Omega' Y_{l'm'}^*(\phi', \theta') \int d\Omega Y_{lm}(\phi, \theta) = \\ &= -4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k') \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k) \delta_{l'0} \delta_{m'0} \delta_{l0} \delta_{m0} \end{aligned} \quad (2.33)$$

gdzie:  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  i analogicznie dla zmiennych primowanych.

W trzecim przejściu skorzystano z faktu, że funkcja charakterystyczna kuli pędowej  $B(0, \kappa)$  zapisuje się w zmiennych sferycznych szczególnie prosto. Nie zależąc od zmiennych kątowych, sprowadza się do funkcji charakterystycznej przedziału jednowymiarowego:

$$\mathbb{I}_{B(0,\kappa)}(\mathbf{k}) = \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k) \quad (2.34)$$

Dzięki powyższemu, obie funkcje charakterystyczne można wyjąć przed znak całki. Co więcej, całka po dwóch kątach bryłowych rozbija się na iloczyn dwóch całek. Pod każdą z nich znajduje się harmonika sferyczna. Całka z harmoniki sferycznej po pełnym kącie

bryłowym może być potraktowana jako iloczyn skalarny tej harmoniki z funkcją stałą. Zauważmy teraz, że harmonika  $Y_{00}$  jest właśnie funkcją stałą o wartości  $(4\pi)^{-1/2}$ , a z faktu, że poszczególne harmoniki sferyczne są do siebie ortogonalne, wynika ostatecznie, iż:

$$\int d\Omega Y_{lm}(\phi, \theta) = \sqrt{4\pi} \int d\Omega Y_{lm}(\phi, \theta) Y_{00}^*(\phi, \theta) = \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0} \quad (2.35)$$

Powyższy fakt wykorzystany został w czwartym, ostatnim przejściu w (2.33).

Posługując się (2.32) i (2.33), możemy teraz obliczyć diagonalne elementy macierzowe poszczególnych wyrazów szeregu Bohra (2.30). Dla zerowego wyrazu:  $\hat{B}_0 = \hat{V}_w$ , zatem w sposób trywialny mamy:

$$\langle k_\alpha l m | \hat{B}_0 | k_\alpha l m \rangle = -4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0, \kappa)}(k) \delta_{l0} \delta_{m0} \quad (2.36)$$

Kolejne wyrazy, choć coraz bardziej rozbudowane, nie sprawiają większych problemów obliczeniowych dzięki szczególnie prostym postaciom elementów macierzowych  $G_{0\alpha}^+$  oraz  $\hat{V}_w$ . I tak, element diagonalny pierwszego wyrazu oblicza się:

$$\begin{aligned} \langle k_\alpha l m | \hat{B}_1 | k_\alpha l m \rangle &= \quad (2.37) \\ &= \frac{1}{\hbar} \sum_{l_1 m_1 l_2 m_2} \int k_1^2 dk_1 k_2^2 dk_2 \langle k_\alpha l m | \hat{V}_w | k_1 l_1 m_1 \rangle \langle k_1 l_1 m_1 | G_{0\alpha}^+ | k_2 l_2 m_2 \rangle \langle k_2 l_2 m_2 | \hat{V}_w | k_\alpha l m \rangle = \\ &= \frac{2\mu}{\hbar^2} (-4\pi\gamma)^2 \mathbb{I}_{[0, \kappa)}(k_\alpha) \delta_{l0} \delta_{m0} \int k_1^2 dk_1 \mathbb{I}_{[0, \kappa)}(k_1) \frac{1}{k_\alpha^2 - k_1^2 + i\varepsilon} = \\ &= \frac{32\pi^2 \gamma^2 \mu}{\hbar^2} \mathbb{I}_{[0, \kappa)}(k_\alpha) \delta_{l0} \delta_{m0} \int_0^\kappa \frac{k_1^2 dk_1}{k_\alpha^2 - k_1^2 + i\varepsilon} \end{aligned}$$

W drugim przejściu dokonano podstawienia (2.32) i (2.33) pod odpowiednie elementy macierzowe, a następnie łatwo wysumowano po wszystkich czterech dyskretnych liczbach kwantowych oraz wyciąkowano po  $k_2$ .

Pojawiającą się na końcu (2.37) całkę, którą oznaczymy przez  $I(\kappa, k_\alpha)$ , należy traktować w sensie granicznym ze względu na  $\varepsilon$ , tj.:

$$I(\kappa, k_\alpha) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\kappa \frac{k_1^2 dk_1}{k_\alpha^2 - k_1^2 + i\varepsilon} \quad (2.38)$$

Całkę tę można obliczyć metodami analizy zespolonej (por. Rozdział 6), otrzymując:

$$I(\kappa, k_\alpha) = \frac{k_\alpha}{2} \left( \ln \frac{\kappa + k_\alpha}{\kappa - k_\alpha} - i\pi \right) - \kappa \quad (2.39)$$

Warto zwrócić w tym miejscu uwagę, że przechodząc do granicy  $\kappa \rightarrow \infty$  (a więc do potencjału niezrenormalizowanego), całka  $I(\infty, k_\alpha)$  jest rozbieżna dla każdego  $k_\alpha$ . To właśnie te „niefizyczne nieskończoności” były wspomniane w poprzednim podrozdziale jako jedna z motywacji wprowadzenia pędu obciążenia.

Elementy diagonalne drugiego i dalszych wyrazów Bohra można obliczyć w analogiczny sposób jak dla  $\hat{B}_1$ . Okazuje się (żmudny, acz nietrudny dowód indukcyjny pomijamy), że dla  $n$ -tego wyrazu Bohra:

$$\langle k_\alpha l m | \hat{B}_n | k_\alpha l m \rangle = -4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha) \delta_{l0} \delta_{m0} \left( -\frac{8\pi\gamma\mu}{\hbar^2} I(\kappa, k_\alpha) \right)^n \quad (2.40)$$

Powyższy wzór jest słuszny dla wszystkich<sup>7</sup>  $n = 0, 1, 2, \dots$

Sumując (2.40) po  $n$ , otrzymujemy  $\langle k_\alpha l m | T | k_\alpha l m \rangle$  na mocy (2.30). Przyjmując odpowiednie założenie na iloraz otrzymanego (zespolonego) szeregu geometrycznego, dostajemy:

$$\begin{aligned} \langle k_\alpha l m | T | k_\alpha l m \rangle &= -4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha) \delta_{l0} \delta_{m0} \sum_{n=0}^{\infty} \left( -\frac{8\pi\gamma\mu}{\hbar^2} I(\kappa, k_\alpha) \right)^n = \\ &= \frac{-4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha) \delta_{l0} \delta_{m0}}{1 + \frac{8\pi\gamma\mu}{\hbar^2} I(\kappa, k_\alpha)} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Chcąc teraz otrzymać  $\langle \mathbf{k}'_\alpha | T | \mathbf{k}_\alpha \rangle$ , dokonujemy zmiany bazy w powyższym wzorze zgodnie z (2.28). Dzięki obecności delt Kroneckera  $\delta_{l0}$ ,  $\delta_{m0}$ , operacja ta jest trywialna. Otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'_\alpha | T | \mathbf{k}_\alpha \rangle &= Y_{00}(\phi', \theta') Y_{00}^*(\phi, \theta) \frac{-4\pi\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha)}{1 + \frac{8\pi\gamma\mu}{\hbar^2} I(\kappa, k_\alpha)} = \\ &= \frac{-\gamma \mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha)}{1 + \frac{8\pi\gamma\mu}{\hbar^2} I(\kappa, k_\alpha)} \end{aligned} \quad (2.42)$$

ponieważ  $Y_{00} \equiv (4\pi)^{1/2}$ .

Możemy teraz ostatecznie zapisać wzór na amplitudę rozpraszania w funkcji wartości pędu cząstki rozpraszanej  $f(k_\alpha)$ . Na mocy (2.27) oraz (2.39) mamy:

$$f(k_\alpha) = \frac{\mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha)}{\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu\gamma} + \frac{2}{\pi} I(\kappa, k_\alpha)} = \frac{\mathbb{I}_{[0,\kappa]}(k_\alpha)}{\frac{\hbar^2}{4\pi^2\mu\gamma} - \frac{2\kappa}{\pi} + \frac{k_\alpha}{\pi} \left( \ln \frac{\kappa+k_\alpha}{\kappa-k_\alpha} - i\pi \right)} \quad (2.43)$$

Jak widać, wynik nie zależy od zmiennych kątowych. Jest to bezpośrednia konsekwencja faktu, że jedynie elementy macierzy  $T$  odpowiadające  $l = m = 0$  są niezerowe, co z kolei jest w pełnej zgodności z założeniem, iż rozpraszanie odbywa się jedynie w fali  $s$ . Notabene, w powyższym rozumowaniu nie skorzystaliśmy z tego założenia *jawnie* – okazuje się ono wbudowane już w samą postać efektywnego oddziaływania  $\hat{V}_w$ .

Z (2.43) można również odczytać, że cząstka obdarzona pędem o wartości przekraczającej  $\kappa$  nie ulegnie rozproszeniu. Jest to oczywiste, albowiem bezpośrednio z definicji potencjału (2.26) wynika, że „nie widzi” on cząstek o takim pędzie.

<sup>7</sup>Por. w szczególności dla (2.36) i (2.37).

### 2.3.3 Uwzględnienie spinu

Aby zakończyć analizę rozproszeniową fermionu na fermionie, musimy jeszcze uwzględnić spin. W tym celu zapiszmy w pierw asymptotyczną postać funkcji  $\psi_w$  stanowiącej rozwiązanie równania Schrödingera bez czasu (2.22) w bazie położeniowej (por. (S 40.12)):

$$\psi_w(\mathbf{r}_w) \stackrel{r_w \rightarrow \infty}{\cong} C \left( e^{ik_\alpha z_w} + f(k_\alpha) \frac{e^{ik_\alpha r_w}}{r_w} \right) \quad (2.44)$$

gdzie  $C$  to stała normalizacyjna, natomiast  $\mathbf{r}_w$  ma sens względnego położenia fermionów:  $\mathbf{r}_w = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . Przyjeliśmy też, że fala padająca porusza się wzdłuż osi  $z$ .

Również funkcję  $\psi_M$  wyrażającą się w bazie pędowej wzorem (2.24) możemy zapisać w bazie położeniowej. Konkretna postać  $\psi_M(\mathbf{r}_M)$  nie jest dla nas istotna<sup>8</sup>. Istotne za chwilę będzie jednak to, że jej argument  $\mathbf{r}_M$  ma sens położenia środka masy oddziałującej pary fermionów:  $\mathbf{r}_M = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ .

Asymptotyczną postać rozwiązania wyjściowego równania Schrödingera (2.13) można zatem zapisać w bazie położeniowej jako:

$$\Psi_{\lambda_1 \lambda_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi_M \left( \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), t \right) \left( e^{ik_\alpha(z_1 - z_2)} + f(k_\alpha) \frac{e^{ik_\alpha |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) |\lambda_1 \lambda_2\rangle \quad (2.45)$$

Funkcję spinową  $|\lambda_1 \lambda_2\rangle$  pozostawiamy w postaci abstrakcyjnej.

Funkcja (2.45), jakkolwiek stanowi matematyczne rozwiązanie równania Schrödingera (2.13), nie może jako taka opisywać pary fermionów, albowiem nie jest całkowicie antysymetryczna ze względu na przestawienie cząstek  $1 \leftrightarrow 2$ . Z czterech funkcji:  $\Psi_{\uparrow\uparrow}, \Psi_{\uparrow\downarrow}, \Psi_{\downarrow\uparrow}, \Psi_{\downarrow\downarrow}$  można skonstruować następujące cztery całkowicie antysymetryczne funkcje falowe:

$$\begin{aligned} \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \frac{1}{2} [\Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \Psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + \Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t) - \Psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)] \\ \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \Psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)] \\ \Psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \frac{1}{2} [\Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) + \Psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t) - \Psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)] \\ \Psi_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) - \Psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, t)] \end{aligned} \quad (2.46)$$

co po podstawieniu (2.45) daje (z dokładnością do czynnika fazowego):

$$\begin{aligned} \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \psi_M \left( \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), t \right) \left[ \cos k_\alpha(z_1 - z_2) + f(k_\alpha) \frac{e^{ik_\alpha |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \sqrt{2} \psi_M \left( \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), t \right) \sin k_\alpha(z_1 - z_2) |\uparrow\uparrow\rangle \\ \Psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \psi_M \left( \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), t \right) \sin k_\alpha(z_1 - z_2) (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ \Psi_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) &= \sqrt{2} \psi_M \left( \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), t \right) \sin k_\alpha(z_1 - z_2) |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.47)$$

Jak widać, jedynie  $\Psi_1$  odznacza się niezerową amplitudą rozpraszania równą  $f(k_\alpha)$  i to właśnie ta funkcja falowa opisuje stan rozproszeniowy pary fermionów o względnym pedzie o wartości  $k_\alpha$ .

<sup>8</sup>Będzie ona opisywać paczkę falową w rodzaju trójwymiarowego odpowiednika (S 12.20).

Wynikają stąd dwa ważne spostrzeżenia. Po pierwsze, pomimo niezerowego zasięgu potencjału oddziaływania, jedynie pary fermionów o przeciwnych spinach będą się rozpraszać na sobie. Po drugie, procedura antysymetryzacji nie wpłynęła na postać amplitudy rozpraszania. Wzór (2.43) jest więc wciąż w mocy, jakkolwiek dotyczy jedynie kanału singletowego  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ .

## 2.4 Wnioski. Ostateczna postać efektywnego potencjału oddziaływania.

Cała powyższa analiza rozproszeniowa miała na celu uzyskanie amplitudy rozpraszania fermion-fermion (2.43). Zapiszmy ten wzór wstawiając parametry potencjału  $\hat{V}_{k_c}$  ( $g$  oraz  $k_c$ ) oraz masę fermionu  $m$  w miejsce zmiennych pomocniczych zgodnie z przepisem:  $\mu \mapsto \frac{m}{2}$ ,  $\kappa \mapsto \frac{k_c}{2}$ ,  $\gamma \mapsto \frac{g}{2(2\pi)^3}$  (por. (2.26)).

Otrzymujemy:

$$f(k_\alpha) = \frac{\mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_\alpha)}{\frac{8\pi\hbar^2}{mg} - \frac{k_c}{\pi} + \frac{k_\alpha}{\pi} \left( \ln \frac{k_c + 2k_\alpha}{k_c - 2k_\alpha} - i\pi \right)} \quad (2.48)$$

Zależność ta w granicy niskoenergetycznej musi zgadzać się z zależnością (2.3). Aby przedstawić związki, jakie muszą być spełnione między zadanymi parametrami rozpraszania  $a$  i  $r_{\text{eff}}$  a parametrami potencjału  $g$  oraz  $k_c$ , rozwińmy mianownik we wzorze (2.48) w szereg Maclaurina względem  $k_\alpha$ :

$$\frac{8\pi\hbar^2}{mg} - \frac{k_c}{\pi} + \frac{k_\alpha}{\pi} \left( \ln \frac{k_c + 2k_\alpha}{k_c - 2k_\alpha} - i\pi \right) = \left( \frac{8\pi\hbar^2}{mg} - \frac{k_c}{\pi} \right) - ik_\alpha + \frac{4}{\pi k_c} k_\alpha^2 + O(k_\alpha^4) \quad (2.49)$$

Porównanie powyższego rozwinięcia z mianownikiem prawej strony wzoru (2.3) daje następujące dwie równości:

$$a = \left( \frac{k_c}{\pi} - \frac{8\pi\hbar^2}{mg} \right)^{-1} \quad \text{oraz} \quad r_{\text{eff}} = \frac{8}{\pi k_c} \quad (2.50)$$

Zasięg efektywny  $r_{\text{eff}}$  stanowi miarę zasięgu oddziaływania między fermionami. Na mocy definicji *rozzredzonności* gazu podanej w podrozdziale 2.1, zależy nam, aby zasięg ten był mały w porównaniu z odwrotnością pędu Fermiego  $k_F$ . Żądanie to oraz drugi ze wzorów (2.50) stanowią razem uzasadnienie warunku (2.12) wprowadzonego w poprzednim podrozdziale znacznie mniej ściśle.

W dalszej części pracy wygodnie będzie posługiwać się parametrami  $\frac{1}{a}$  oraz  $k_c$ . W związku z tym wyrażmy jeszcze  $g$  właśnie za ich pomocą. Na mocy pierwszej równości z (2.50) mamy:

$$g = \frac{8\pi^2\hbar^2}{m \left( k_c - \frac{\pi}{a} \right)} \quad (2.51)$$

Powyższy wzór stanowi uwieńczenie tego rozdziału. Dookreśla on wprowadzony w Rozdziale 2.2 potencjał efektywny  $\hat{V}_{k_c}$ , który tym samym staje się gotowy do opisu rozrzedzonego gazu fermionów. Jest to przedmiotem kolejnych rozdziałów.

# Rozdział 3

## Metoda HFB

W pracy tej wykorzystano metodę Hartree-Focka-Bogolubowa w ujęciu Dobaczewskiego [13]. Również użyte oznaczenia odpowiadają tym zawartym w [13]. Nierzadko będziemy się odnosić do podanych (i wyprowadzonych) tam wzorów, przy czym odpowiednie odnośniki będą postaci (D <nr wzoru w [13]>).

### 3.1 Uwagi wstępne

#### 3.1.1 Notacja

W tym i w kolejnych rozdziałach będziemy posługiwać się tzw. notacją abstrakcyjno-wskaźnikową zwaną również notacją tensorową, powszechnie stosowaną w elektrodynamice (por. np. [25]) i relatywistyce (por. np. [26]). Umożliwia ona zwarty zapis wielu wzorów zawierających tensory w wybranej bazie, jakkolwiek struktura tych wzorów nie zależy od konkretnej bazy.

Wiele obiektów pojawiających się w niniejszym rozdziale ma charakter tensorowy. My wszakże, pracując na macierzach tych tensorów, będziemy te obiekty nazywać (za Dobaczewskim) po prostu *macierzami*.

Przykładowo, macierze  $A$  i  $B$  transformacji Bogolubowa (por. (3.6)) w notacji abstrakcyjno-wskaźnikowej będą niekiedy zapisywane jako  $A^\mu_\nu$  i  $B_{\mu\nu}$ , gdzie tzw. *indeksy jednocząstkowe*  $\mu, \nu$  mają sens zupełnych zbiorów liczb kwantowych (np. w reprezentacji pędowo-spinowej  $\mu = \mathbf{k}\lambda$ ).

Pozycja góra-dół każdego z indeksów informuje o własnościach transformacyjnych danej macierzy ze względu na ten indeks.

I tak, ze względu na *górnny* indeks macierz  $A$  podlega następującej regule transformacyjnej:

$$A^\mu_\nu = \sum_\sigma \langle \mu | \sigma \rangle A^\sigma_\nu \quad (3.1)$$

natomiast ze względu na *dolny* indeks odpowiednia reguła ma postać:

$$A^\mu_\nu = \sum_\sigma \langle \sigma | \nu \rangle A^\mu_\sigma \quad (3.2)$$

W przypadku macierzy dwuwskaznikowych istotna jest również kolejność lewo-prawo indeksów. Nawiązując do klasycznej formy prezentacji macierzy jako tablicy liczb, indeks *lewy* oznacza poszczególne wiersze, a *prawy* – poszczególne kolumny macierzy. Tym samym, kolejność indeksów determinuje sposób mnożenia macierzy. Przyjmujemy przy tym konwencję sumacyjną, w myśl której wykonujemy sumowanie po powtarzających się indeksach jednocząstkowych.

Mając w pamięci nakreślone powyżej reguły, można w prosty sposób przedstawić działanie operacji transpozycji, sprzężenia zespolonego oraz sprzężenia hermitowskiego macierzy. I tak, transpozycja zamienia kolejność lewo-prawo indeksów, sprzężenie zespolone zamienia pozycje góra-dół indeksów, natomiast sprzężenie hermitowskie jest złożeniem obu tych operacji. Np. dla macierzy  $A$ :

$$\begin{aligned}(A^T)^\mu{}_\nu &= A_\nu{}^\mu, \\ (A^*)^\mu{}_\nu &= \bar{A}_\mu{}^\nu \\ (A^+)^\mu{}_\nu &= \bar{A}^\nu{}_\mu\end{aligned}\tag{3.3}$$

gdzie przyjmujemy umowę, że gwiazdką  $*$  oznaczamy sprzężenie zespolone macierzy, podczas gdy podkreślenie górne  $\bar{\phantom{x}}$  oznacza „liczbowe” sprzężenie zespolone. Różnica w działaniu  $*$  oraz  $\bar{\phantom{x}}$  na macierz jest taka, że ta pierwsza operacja wpływa na własności transformacyjne macierzy, natomiast druga – jedynie sprzęga w sposób zespolony jej elementy.

Notację tensorową wraz z konwencją sumacyjną stosować będziemy jedynie do macierzy. W szczególności nie będą nimi objęte obiekty jednowskaznikowe (jak np. operatory kreacji-anihilacji czy współczynniki  $u_\mu$ ,  $v_\mu$ ). Od samych macierzy odróżniać się w zapisie będą *elementy* tych macierzy, tradycyjnie indeksowane dolnie i nieobjęte konwencją sumacyjną.

Zapiszmy przykładową równoważność notacyjną (w bazie dyskretnej), która powinna rozwiązać wszelkie wątpliwości:

$$(A^T)^\sigma{}_\mu B_{\sigma\pi} \delta^\pi{}_\nu = \sum_{\sigma\pi} A_{\sigma\mu} B_{\sigma\pi} \delta_{\pi\nu}\tag{3.4}$$

Lewa strona jest zapisana za pomocą notacji tensorowej, a prawa – notacji konwencjonalnej.  $\delta^\pi{}_\nu$  to dwuwskaznikowa macierz jednostkowa. Jej element daje się zapisać jako odpowiednia delta Kroneckera, stąd na jej oznaczenie użyto tej samej greckiej litery.

### 3.1.2 Dyskretyzacja bazy pędowej

Ponieważ wzór (2.51) wiążący stałą sprzężenia  $g$  z długością rozpraszania  $a$  i pędem obciążenia  $k_c$  wyprowadziliśmy dla układu o ciągłej (nieprzeliczalnej) bazie stanów jednocząstkowych, również równania HFB będziemy chcieli rozwiązać dla takiego układu. Niestety, gdybyśmy w tym celu od początku posługiwali się ciągłą bazą stanów, natrafiłobyśmy dość szybko na poważne problemy natury matematycznej i interpretacyjnej. Dlatego zastosujemy podejście dobrze znane z wielu elementarnych kursów mechaniki kwantowej (por. np. [7]), polegające na rozważeniu w pierw układu zamkniętego w sześciennym pudełku o boku  $L$  z okresowymi warunkami brzegowymi nałożonymi na funkcje falowe jednocząstkowych stanów bazowych.



W odpowiednim momencie, pod koniec wyprowadzenia, przejdziemy z  $L$  do  $+\infty$ . W szczególności, dla bazy fal płaskich  $|\mathbf{k}\rangle$  przejście to będzie się wiązało z zastąpieniem dyskretnego zbioru stanów zbiorem ciągłym. Wówczas sumy po  $\mathbf{k}$  formalnie przejdą w całki zgodnie z następującym przepisem<sup>1</sup>:

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_{\mathbf{k} \in X} \xrightarrow{L \rightarrow +\infty} \int_{\mathbf{k} \in X} d^3\mathbf{k} \quad (3.5)$$

### 3.1.3 Uwagi na temat metody HFB

Metoda HFB może być postrzegana jako metoda wariacyjna. W zasadzie polega ona bowiem na warunkowej minimalizacji wartości oczekiwanej hamiltonianu (2.1) na klasie tzw. *stanów iloczynowych*, przy czym warunkiem jest ustalona wartość oczekiwana operatora liczby cząstek. Szukany stan realizujący to minimum nazywa się *rozwiązaniem samozgodnym*.

Stany iloczynowe definiuje się jako próżnie fermionowych operatorów anihilacji  $\alpha_\mu$  związanych z operatorami kreacji-anihilacji „prawdziwych” fermionów transformacją Bogolubowa (por. (D 3.1) oraz (D 3.3)):

$$\alpha_\mu = \sum_\nu \bar{A}_{\nu\mu} a_\nu + \bar{B}_{\nu\mu} a_\nu^\dagger \quad (3.6)$$

Własności transformacyjne macierzy definiujących powyższą transformację wiążą się z następującym sposobem ich indeksowania:  $A^\mu_\nu$  oraz  $B_{\mu\nu}$ .

Operator  $\alpha_\mu$  oraz jego sprzężenie hermitowskie  $\alpha_\mu^\dagger$  noszą nazwy odpowiednio *operatora anihilacji* oraz *operatora kreacji kwazicząstki* (w stanie  $\mu$ ). Są to, jak już wspomniano, operatory fermionowe, tj. ich rodzina spełnia odpowiednie relacje antykomutacyjne:

$$\begin{aligned} \{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} &= 0, \\ \{\alpha_\mu, \alpha_\nu^\dagger\} &= \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Relacje antykomutacyjne (3.7) oraz ich odpowiedniki dla operatorów kreacji-anihilacji „prawdziwych fermionów”  $a_\mu$ ,  $a_\mu^\dagger$  wymuszają spełnienie szeregu związków między macierzami  $A$  i  $B$  (por. (D 3.18) i (D 3.19)).

Na mocy lematu o jednoznaczności próżni (D 1-4), para macierzy  $A$ ,  $B$  określa dokładnie jeden stan iloczynowy. Poszukiwanie rozwiązania samozgodnego sprowadza się zatem do szukania determinującej go pary macierzy.

Rzecz jasna, inna taka para związana z parą  $A$ ,  $B$  transformacją unitarną opisuje ten sam stan. Wynika to ze swobody wyboru bazy jednocząstkowej, w której dokonujemy opisu. Fakt ten skłania do próby wybrania takiej bazy, w której przynajmniej jedna z macierzy  $A$ ,  $B$  określających rozwiązanie samozgodne jest diagonalna. Znacznie uprościłoby to zawierającą ją wzory.

Okazuje się, iż stany iloczynowe skonstruowane są tak specyficznie, że dla każdego z nich można wybrać bazę, która nie tylko diagonalizuje jedną z macierzy  $A$ ,  $B$ , ale również drugą z nich sprowadza do prostej (choć niediagonalnej) postaci.

<sup>1</sup>Jest to nic innego jak szczególny przypadek sumy Riemanna, w granicy  $L \rightarrow +\infty$  przechodzącej w całkę.

Taką bazą jest tzw. *baza kanoniczna* stanu iloczynowego. Można ją zdefiniować jako taką bazę jednočástkową  $|\mu\rangle$ , w której macierz  $A$  jest diagonalna, natomiast macierz  $B$  jest *macierzą antysymetryczną w postaci kanonicznej*, tzn. ich elementy mają postać (por. (D 4.108)):

$$\begin{aligned} A_{\mu\nu} &= u_\mu \delta_{\mu\nu}, \\ B_{\mu\nu} &= \bar{s}_{\tilde{\mu}} v_\mu \delta_{\tilde{\mu}\nu}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Operacja  $\sim$  przyporządkowuje każdemu indeksowi jednočástkowemu  $\mu$  pewien różny od niego indeks  $\tilde{\mu}$ , przy czym:  $\tilde{\tilde{\mu}} = \mu$ . Parę stanów jednočástkowych  $|\mu\rangle, |\tilde{\mu}\rangle$  nazywać będziemy stanami *kanonicznie sprzężonymi*.

Z kolei wielkość  $s_{\tilde{\mu}}$  jest pewnym zespolonym czynnikiem fazowym o własności:  $s_{\tilde{\mu}} = -s_\mu$  (por. (D 4.91b-c)). Wybór konkretnych wartości  $s_\mu$  (tj. *konwencji faz* stanów bazy kanonicznej) podyktowany będzie względami wygody i dokonamy go w stosownym momencie wyprowadzenia równań HFB dla badanego układu.

Współczynniki  $u_\mu$  oraz  $v_\mu$  są liczbami rzeczywistymi związanymi następującym warunkiem normalizacyjnym (D 4.130):

$$u_\mu^2 + v_\mu^2 = 1. \quad (3.9)$$

Jak wynika ze wzorów (D 4.91a) oraz (D 4.106a-b), zachodzą też równości:

$$\begin{aligned} u_\mu &= u_{\tilde{\mu}}, \\ v_\mu &= v_{\tilde{\mu}}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Współczynnikom tym można częściowo nadać interpretację fizyczną. Dokonamy tego w kontekście badanego układu w dalszej części wykładu.

W ogólnym przypadku określenie bazy kanonicznej rozwiązania samozgodnego możliwe jest dopiero po rozwiązaniu równań HFB poprzez diagonalizację otrzymanej macierzy  $A$ . Istnieje jednak twierdzenie, zwane *twierdzeniem o samozgodnych symetriach*, pozwalające wyspecyfikować bazę kanoniczną rozwiązania samozgodnego jedynie na podstawie nałożonych na nie symetrii. W ten sposób równania HFB można rozwiązywać od razu w tej wygodnej bazie.

Po dokładną treść i dowód twierdzenia o samozgodnych symetriach por. Rozdziały 8.4 oraz 9.4 w [13]. Tu skorzystamy jedynie z wniosku dotyczącego symetrii ciągłych, który stanowi, że *bazę kanoniczną rozwiązania samozgodnego zachowującego symetrię jednočástkową można wybrać tak, aby jej stany były stanami własnymi generatora symetrii* (por. akapit następujący po wzorze (D 8.73)).

## 3.2 Symetrie badanego układu

Fizyczne właściwości badanego przez nas układu związane są z szeregiem symetrii, jakimi odznaczać się musi każdy stan własny układu. Nałożymy je również na szukane rozwiązanie samozgodne, co pozwoli wyspecyfikować bazę kanoniczną tego stanu. Jest

to równoznaczne z ograniczeniem klasy wariacyjnej, po której dokonujemy minimalizacji wartości oczekiwanej hamiltonianu układu.

Wymieńmy i umotywuujemy teraz te symetrie.

### a) Symetria przesunięć

Badanym przez nas układem jest jednorodny gaz. Jednorodność gazu oznacza właśnie symetrię ze względu na przesunięcia. Wymagamy zatem zachowania tej symetrii przez stan samozgodny.

Konsekwencją tego warunku oraz twierdzenia o samozgodnych symetriach (D 8-7) jest możliwość wybrania bazy kanonicznej rozwiązania samozgodnego złożonej ze stanów własnych generatora symetrii przesunięć. Generatorem tej symetrii jest operator pędu, zatem jako bazę kanoniczną rozwiązania samozgodnego można wybrać bazę fal płaskich  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ , zwaną również dalej bazą pędowo-spinową.

### b) Symetria odwrócenia czasu ( $T$ -parzystość)

Zarówno operator energii kinetycznej  $\hat{T}$ , jak i operator zapostulowanego przez nas oddziaływania efektywnego  $\hat{V}_{ke}$  są symetryczne ze względu na inwersję czasu. Co więcej, o badanym układzie zakładamy, że znajduje się w równowadze. Z tych powodów na szukane rozwiązanie samozgodne nakładamy warunek  $T$ -parzystości.

Zgodnie z rozważaniami przeprowadzonymi w podrozdziale 9.2.6. w [13], w przypadku bazy kanonicznej stanów iloczynowych  $T$ -parzystych można tak dobrać pary stanów kanonicznie sprzężonych, by były one jednocześnie stanami wzajemnie odwróconymi w czasie – z dokładnością do pewnego czynnika fazowego.

W połączeniu z warunkiem a. oznacza to, iż formalnie<sup>2</sup>:

$$\widetilde{\mathbf{k}\lambda} = -\mathbf{k}, -\lambda, \quad (3.11)$$

albowiem<sup>3</sup>:  $\hat{T}_{\text{inv}}|\mathbf{k}\lambda\rangle = s_{\mathbf{k}\lambda}|-\mathbf{k}, -\lambda\rangle$ , gdzie  $\hat{T}_{\text{inv}}$  oznacza operator inwersji czasowej (D 9-5), natomiast  $s_{\mathbf{k}\lambda}$  jest czynnikiem fazowym wprowadzonym w podrozdziale 3.1.3.

### c) Symetria odwrócenia spinu

Rozważać będziemy gaz złożony z  $N$  fermionów o spinie  $\frac{1}{2}$ , w którym dokładnie po  $N/2$  cząstek ma przeciwnie zwrócone spiny. Warunek ten, w odróżnieniu od dwu poprzednich, nie ma fundamentalnego uzasadnienia fizycznego. W szczególności, rozważa się układy, w których proporcja liczb cząstek o przeciwnych spinach jest różna od 1:1 (*układy spolaryzowane*) [27, 28].

My zajmiemy się jednakże najprostszym przypadkiem. W stosownym momencie wyprowadzenia założymy, że elementy macierzy  $A$  i  $B$  zapisanych w bazie pędowo-spinowej  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  zależą od kierunku spinu  $\lambda$  w taki sposób, że fizyka rozwiązania samozgodnego okaże się „nieczuła” na zamianę wszystkich liczb spinowych na przeciwne.

Powyższa bardzo jakościowa uwaga zostanie uściślona w podrozdziale 3.3.11.

<sup>2</sup>Por. (D 9.44b) oraz (D 9.46).

<sup>3</sup>Por. (D 9.56a).

#### d) Parzysta liczba cząstek w układzie

Choć właściwie nie jest to symetria, zauważmy, że warunki b. i c. milcząco zakładają, że liczba fermionów w gazie  $N$  jest parzysta. Również Dobaczewski w [13] koncentruje się przede wszystkim na stanach parzystych.

W przypadku gazów fermionowych liczba cząstek jest bardzo duża i z punktu widzenia właściwości termodynamicznych można bez straty ogólności zakładać, że  $N$  jest parzyste. Pozwala to ominąć pewne trudności interpretacyjne i rachunkowe.

### 3.3 Równania HFB dla rozrzedzonego gazu fermionów

Po tym (z konieczności skrótowym) wstępie, przejdźmy do wyprowadzenia równań HFB dla badanego przez nas układu.

Jak wspomniano w podrozdziale 3.1.2, rozważamy układ w sześciennym pudełku o boku  $L$  z okresowymi warunkami brzegowymi narzuconymi na stany bazy jednocząstkowej. Posługiwać się będziemy bazą fal płaskich (pędowo-spinową)  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ , gdzie  $\lambda$  przebiega zbiór  $\{\uparrow, \downarrow\}$ , natomiast  $\mathbf{k}$  – zbiór  $\{\frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ .

#### 3.3.1 Antysymetryzowana macierz potencjału oddziaływania $\hat{V}$

Wyprowadzenie zaczniemy od zapisania wzoru na element *antysymetryzowanej macierzy potencjału oddziaływania*  $V_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2 \mathbf{k}'_1\lambda'_1 \mathbf{k}'_2\lambda'_2}$  (por. (D 1.68)):

$$V_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2 \mathbf{k}'_1\lambda'_1 \mathbf{k}'_2\lambda'_2} = -\frac{g}{2L^3} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2} \mathbb{I}_{B(0, k_c)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \mathbb{I}_{B(0, k_c)}(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2) \times \quad (3.12)$$

$$\times (\delta_{\lambda_1\lambda'_1} \delta_{\lambda_2\lambda'_2} - \delta_{\lambda_1\lambda'_2} \delta_{\lambda_2\lambda'_1})$$

Wzór ten stanowi nic innego jak zantysymetryzowaną wersję wzoru (2.8) z jednym zastrzeżeniem: w zapostulowanym przez nas uprzednio potencjale efektywnym w miejscu  $L^3$  występowała liczba  $(2\pi)^3$ . Różnica ta związana jest jedynie z inną normalizacją jednocząstkowych funkcji falowych opisujących układ „w pudełku”.

Stała sprzężenia  $g$  związana jest z długością rozpraszania  $a$  i pędem obciążenia  $k_c$  wzorem (2.51).

#### 3.3.2 Postać równań HFB w dowolnej bazie jednocząstkowej

Niewiadomymi w równaniach HFB są macierze  $A$  i  $B$  determinujące stan iloczynowy. Zapiśmy ich elementy w bazie kanonicznej (por. (3.8)). Symetrie a), b) narzucone na rozwiązanie samozgodne w poprzednim podrozdziale implikują, że jako stany bazy kanonicznej można wziąć właśnie stany bazy pędowo-spinowej  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  oraz że:

$|\widetilde{\mathbf{k}\lambda}\rangle = |-\mathbf{k}, -\lambda\rangle$ . Otrzymujemy:

$$A_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2} = u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (3.13)$$

$$B_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2} = \bar{s}_{-\mathbf{k}_1, -\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} =$$

$$= -\bar{s}_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}$$

Gdzie skorzystano ze wzmiankowanej już wcześniej (por. 3.1.3) tożsamości spełnianej przez czynnik fazowy:  $s_{\bar{\mu}} = -s_{\mu}$ .

Same równania HFB Dobaczewski zapisuje w postaci zwartego wzoru (D 9.105). Tu jednak wprowadzimy je od razu za pomocą równoważnego wzoru (D 9.111) wzbogaconego o definicje pojawiających się w nim obiektów: (D 9.106), (D 9.95) oraz (D 4.79). Będziemy pomijać indeks „0”, który w [13] odnosi oznaczone nim obiekty do rozwiązania samozgodnego.

Równania HFB mają postać:

$$\begin{bmatrix} T + \Gamma - \mu\delta & \Delta \\ -\Delta^* & -T^* - \Gamma^* + \mu\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} E \quad (3.14)$$

gdzie:

- $E$  jest macierzą diagonalną<sup>4</sup>, a na mocy lematu (D 9-10) – dodatnią;
- $\delta$  oznacza macierz jednostkową;
- $\mu$  jest tu (rzeczywistym) współczynnikiem Lagrange’a, mającym fizyczny sens potencjału chemicznego<sup>5</sup>.

Pozostałe obiekty są pewnymi macierzami, których definicja i postać dla badanego przez nas układu zostaną przedstawione w dalszej części rozdziału.

Wzór (3.14) to równanie macierzowe, przy czym tu termin „macierz” wyjątkowo ma normalne znaczenie, dobrze znane z elementarnych kursów algebry liniowej. Z kolei elementami tych macierzy  $2 \times 2$  i  $2 \times 1$  są już macierze w znaczeniu nakreślonym w 3.1.1.

Aby uniknąć potencjalnych nieporozumień, zapiszmy powyższe równanie w postaci układu równań w notacji abstrakcyjno-wskaźnikowej:

$$\begin{aligned} (T + \Gamma - \mu\delta)_{\sigma}^{\mu} A^{\sigma}_{\nu} + \Delta^{\mu\pi} B_{\pi\nu} &= A^{\mu}_{\rho} E^{\rho}_{\nu} \\ -(\Delta^*)_{\mu\sigma} A^{\sigma}_{\nu} - (T^* + \Gamma^* - \mu\delta)_{\mu}^{\pi} B_{\pi\nu} &= B_{\mu\rho} E^{\rho}_{\nu} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Taki sposób zapisu równań HFB ma tę przewagę nad (3.14), że uwidacznia własności transformacyjne każdej pojawiającej się w nich macierzy.

Przejdźmy teraz do omówienia i obliczenia pozostałych macierzy pojawiających się w (3.15). Za pomocą jednej z nich wyrazimy też matematycznie warunek ustalonej wartości oczekiwanej operatora liczby cząstek, przy którym to warunku przeprowadzana jest minimalizacja energii prowadząca do równań HFB (por. 3.1.3). Gdy uczynimy to wszystko, okaże się, że w przypadku badanego układu równania HFB (3.15) znacznie się upraszczają.

<sup>4</sup>Rzecz jasna zmniejsza to dowolność wyboru bazy jednocząstkowej  $|\mu\rangle$ , niemniej jednak taka baza zawsze istnieje, por. dyskusja prowadząca do wzoru (D 9.109).

<sup>5</sup>I stąd jego oznaczenie, które należy odróżniać od oznaczenia indeksu jednocząstkowego.

### 3.3.3 Macierze gęstości $\rho$ i $\kappa$

Macierze gęstości, tzn. hermitowską macierz gęstości  $\rho = \rho^\mu_\nu$  oraz antysymetryczny tensor korelacji par (ang. *pairing tensor*)  $\kappa = \kappa^{\mu\nu}$  odpowiadające stanowi  $|\Phi\rangle$  można zdefiniować jako (por. (D 4.57)):

$$\begin{aligned}\rho_{\mu\nu} &:= \langle \Phi | a_\nu^\dagger a_\mu | \Phi \rangle, \\ \kappa_{\mu\nu} &:= \langle \Phi | a_\nu a_\mu | \Phi \rangle.\end{aligned}\tag{3.16}$$

Pokazuje się, że dla stanu iloczynowego zdeterminowanego przez macierze  $A$  i  $B$ , powyższe macierze gęstości można wyrazić wzorami (D 4.61a,b):

$$\begin{aligned}\rho^\mu_\nu &= (B^*)^{\mu\sigma} (B^T)_{\sigma\nu}, \\ \kappa^{\mu\nu} &= (B^*)^{\mu\sigma} (A^T)_\sigma^\nu.\end{aligned}\tag{3.17}$$

Jak wynika bezpośrednio z definicji macierzy  $\rho$ , jej element diagonalny  $\rho_{\mu\mu}$  daje się zinterpretować jako średnia liczba obsadzeń stanu jednocząstkowego  $\mu$ . Odnotujmy, iż w przypadku układu fermionów liczba ta nie może przekraczać jedności. W związku z tym mówi się raczej o *prawdopodobieństwie obsadzenia* stanu jednocząstkowego  $\mu$  niż o średniej liczbie cząstek w tym stanie.

Aby odzyskać liczbę cząstek w układzie  $N$ , wystarczy dodać do siebie wszystkie elementy diagonalne macierzy  $\rho$ :

$$N = \rho^\mu_\mu = \text{Tr} \rho.\tag{3.18}$$

Na (3.18) można też patrzeć jak na szczególny przypadek wzoru (D 4.59), wyrażającego wartość średnią dowolnego operatora jednocząstkowego  $\hat{F}_1$  w stanie iloczynowym  $|\Phi\rangle$  za pomocą związanej z tym stanem macierzy  $\rho$  oraz macierzy  $F_1$  tego operatora:

$$\langle \Phi | \hat{F}_1 | \Phi \rangle = F_1^\mu_\nu \rho^\nu_\mu = \text{Tr} F_1 \rho.\tag{3.19}$$

Istnieje również odpowiednik powyższego wzoru dla operatora dwucząstkowego  $\hat{F}_2$  (por. (D 4.60)):

$$\langle \Phi | \hat{F}_2 | \Phi \rangle = F_2^{\mu\mu'}_{\nu\nu'} \left( \frac{1}{2} \rho^\nu_\mu \rho^{\nu'}_{\mu'} + \frac{1}{4} (\kappa^+)_{\mu'\mu} \kappa^{\nu'\nu} \right)\tag{3.20}$$

gdzie:  $F_2^{\mu\mu'}_{\nu\nu'}$  jest zantysymetryzowaną macierzą operatora  $\hat{F}_2$  (por. (D 1.68)).

We wzorze tym pojawia się także macierz  $\kappa$ , której nie da się nadać fizycznej interpretacji równie łatwo jak macierzy  $\rho$ . Można jednak dojść do wniosku, że element macierzowy  $\kappa_{\mu\nu}$  stanowi pewną miarę korelacji między obsadzeniami stanów jednocząstkowych  $\mu$  i  $\nu$  w danym stanie iloczynowym. Wnikliwą dyskusję na temat interpretacji fizycznej tensora korelacji par  $\kappa$  można znaleźć w [13], w Rozdziale 4.

Wzory (3.19) i (3.20) pozwalają wyrazić wartość oczekiwaną hamiltonianu (2.1) w stanie iloczynowym  $|\Phi\rangle$ :

$$E_{\text{HFB}} := \langle \Phi | \hat{T} + \hat{V} | \Phi \rangle = T^\mu_\nu \rho^\nu_\mu + V^{\mu\mu'}_{\nu\nu'} \left( \frac{1}{2} \rho^\nu_\mu \rho^{\nu'}_{\mu'} + \frac{1}{4} (\kappa^+)_{\mu'\mu} \kappa^{\nu'\nu} \right)\tag{3.21}$$

To właśnie na minimalizacji warunkowej takiego funkcjonału<sup>6</sup> opiera się metoda HFB.

Przejdźmy teraz do wyrażenia macierzy gęstości przez współczynniki  $v_{\mathbf{k}\lambda}$  i  $u_{\mathbf{k}\lambda}$ . W naszym przypadku, gdy elementy macierzy  $A$  i  $B$  dane są wzorami (3.8), podstawienie do wzoru (3.17) pozwala otrzymać, iż:

$$\begin{aligned}\rho_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{k}'} \bar{B}_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}'\lambda'} B_{\mathbf{k}_2\lambda_2\mathbf{k}'\lambda'} = v_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^2 \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \\ \kappa_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{k}'} \bar{B}_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}'\lambda'} A_{\mathbf{k}_2\lambda_2\mathbf{k}'\lambda'} = -s_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}\end{aligned}\quad (3.22)$$

Jak widać, macierz  $\rho$  jest w tej bazie diagonalna (podobnie jak macierz  $A$ ), natomiast macierz  $\kappa$  jest macierzą antysymetryczną w postaci kanonicznej (podobnie jak macierz  $B$ ).

Element diagonalny macierzy  $\rho$  wyraża się więc przez kwadrat odpowiedniego współczynnika  $v_\mu$ :

$$\rho_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}\lambda} = v_{\mathbf{k}\lambda}^2 \quad (3.23)$$

Na mocy warunku normalizacyjnego (3.9),  $v_{\mathbf{k}\lambda}^2$  jest liczbą z przedziału  $[0, 1]$ . Jest to w pełni zgodne z jego fizyczną interpretacją, którą na mocy powyższego wzoru stanowi prawdopodobieństwo obsadzenia stanu jednocząstkowego  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ . Co godne odnotowania, na mocy równości (3.10) prawdopodobieństwa obsadzenia stanów  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  oraz  $|\mathbf{-k}, -\lambda\rangle$  są sobie równe<sup>7</sup>.

Warunek (3.18) ustalonej średniej liczby cząstek w układzie można teraz zapisać jako:

$$N = \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}\lambda}^2 \quad (3.24)$$

Powyższe równanie pozwoli później wyznaczyć wartość współczynnika Lagrange'a  $\mu$  w równaniach HFB.

Znacznie trudniej jest znaleźć interpretację fizyczną współczynnika  $u_{\mathbf{k}\lambda}$  inną niż trywialna, wynikająca z warunku normalizacyjnego:  $u_{\mathbf{k}\lambda}^2 = 1 - v_{\mathbf{k}\lambda}^2$ .

Warto jednakże w tym miejscu wspomnieć o tzw. czynniku korelacji  $P(\mu\nu)$  między stanami jednocząstkowymi  $\mu$  oraz  $\nu$  (w stanie iloczynowym  $|\Phi\rangle$ ). Jest on zdefiniowany jako różnica prawdopodobieństw *jednoczesnego* obsadzenia stanów  $\mu$  oraz  $\nu$  oraz iloczynu prawdopodobieństw obsadzenia tych dwu stanów *niezależnie* (D 4.135):

$$P(\mu\nu) := \langle \Phi | a_\mu^+ a_\mu a_\nu^+ a_\nu | \Phi \rangle - \langle \Phi | a_\mu^+ a_\mu | \Phi \rangle \langle \Phi | a_\nu^+ a_\nu | \Phi \rangle \quad (3.25)$$

Odjemnik otrzymujemy natychmiast z definicji macierzy  $\rho$  oraz ze wzoru (3.23). Odjemna natomiast wyraża się wzorem (D 4.134). Otrzymujemy:

$$P(\mu\nu) = u_\nu^2 v_\nu^2 \delta_{\mu\nu}. \quad (3.26)$$

Jak widać, jedynie stany kanonicznie sprzężone mogą być wzajemnie skorelowane. Jednakże będą one skorelowane jedynie wówczas, gdy współczynnik  $u_\nu$  będzie różny od zera. To z kolei wymaga (na mocy warunku normalizacyjnego), aby stan jednocząstkowy  $\nu$  nie był całkowicie obsadzony (tzn.  $v_\nu \neq 1$ ). Rzecz jasna, korelacje nie będą dotyczyć stanów całkowicie nieobsadzonych (tzn. takich, że  $v_\nu = 0$ ).

<sup>6</sup>Za jego argumenty można uważać macierze  $A$ ,  $B$  albo macierze  $\rho$ ,  $\kappa$ .

<sup>7</sup>Widać tu związek zachowania symetrii odwrócenia czasu z kanoniczną sprzężonością stanów będących swoimi czasowymi odwróceniami.

### 3.3.4 Jednocząstkowy potencjał średniopolowy $\Gamma$

*Jednocząstkowy potencjał średniopolowy*  $\Gamma$  to obiekt pojawiający się naturalnie w wyprowadzeniu równań HFB (por. [13], Rozdział 9.3). Definiuje się go jako (por. (D 9.92)):

$$\Gamma_{\nu}^{\mu} = V_{\nu\nu'}^{\mu\mu'} \rho_{\mu'}^{\nu'} \quad (3.27)$$

gdzie:  $V_{\nu\nu'}^{\mu\mu'}$  to antysymetryzowana macierz potencjału oddziaływania (por. (3.12) bądź (D 1.68)).

Jak wynika z powyższego wzoru, na jednocząstkowy potencjał  $\Gamma$  można patrzeć jak na pewne średnie pole wytworzone przez fermiony o rozmieszczeniu<sup>8</sup> opisanym macierzą gęstości  $\rho$ . Z tego powodu  $\Gamma$  nazywa się też niekiedy *potencjałem indukowanym macierzą gęstości*  $\rho$  [13].

W przypadku badanego układu, podstawienie (3.12) oraz pierwszego ze wzorów (3.22) do definicji (3.27) pozwala otrzymać:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= \sum_{\lambda,\lambda'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}'\lambda'\mathbf{k}_2\lambda_2\mathbf{k}\lambda} \rho_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}'\lambda'} = \\ &= -\frac{g}{2L^3} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \sum_{k < k_c} v_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k},-\lambda_1}^2. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Potencjał  $\Gamma$  jest zatem w tej bazie diagonalny, podobnie jak macierz gęstości  $\rho$ . Na wartość danego elementu diagonalnego  $\Gamma_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_1\lambda_1}$  składają się prawdopodobieństwa obsadzeń stanów o przeciwnym spinie oraz pędach różniących się od  $\mathbf{k}_1$  o wektor długości nie większej niż  $k_c$ . Jest to zrozumiałe, albowiem potencjał efektywny, z jakim pracujemy, nie dopuszcza oddziaływania między fermionami w stanach niespełniających tych warunków.

Elementy macierzy  $\Gamma_{\nu}^{\mu}$  są liczbami rzeczywistymi.

### 3.3.5 Potencjał korelacji par $\Delta$

Podobnie jak wprowadzony powyżej potencjał  $\Gamma$ , również *potencjał korelacji par*  $\Delta$  pojawia się naturalnie w wyprowadzeniu równań HFB. Definiuje się go jako (por. (D 9.93)):

$$\Delta^{\mu\nu} = \frac{1}{2} V_{\mu'\nu'}^{\mu\nu} \kappa^{\mu'\nu'} \quad (3.29)$$

Macierz  $\Delta$  można interpretować analogicznie jak czyniliśmy to dla potencjału  $\Gamma$ . Powyższy wzór pozwala bowiem patrzeć na  $\Delta$  jako na pewne średnie pole związane z oddziaływaniem międzycząstkowym oraz z korelacjami między stanami bazy jednocząstkowej, które to korelacje opisane są tensorem korelacji par  $\kappa$ . Dlatego też  $\Delta$  zwana jest niekiedy *potencjałem indukowanym tensorem korelacji par*  $\kappa$  [13].

Jak jednak wynika z samej definicji (3.29), technicznie rzecz biorąc macierz  $\Delta^{\mu\nu}$  nie jest macierzą potencjału jednocząstkowego, ponieważ ma inne własności transformacyjne niż macierz operatora takiego potencjału.

<sup>8</sup>Chodzi tu niekoniecznie o rozmieszczenie w trójwymiarowej przestrzeni konfiguracyjnej, a o sposób obsadzenia poszczególnych stanów w abstrakcyjnej bazie jednocząstkowej.



Trudności z fizyczną interpretacją potencjału korelacji par są zbliżone do tych, na które natknęliśmy się wprowadzając tensor korelacji par  $\kappa$ . Można wszakże stwierdzić, że podobnie jak ten ostatni,  $\Delta$  stanowi miarę korelacji obecnych w układzie. W szczególności, w sytuacji braku jakichkolwiek korelacji mamy:  $\Delta = 0$ .

Do kwestii interpretacji  $\Delta$  wrócimy jeszcze w dalszej części pracy, gdzie okaże się, iż w przypadku badanego przez nas układu macierz ta opisuje tzw. *szczelinę energetyczną*.

W analizowanym przypadku, podstawienie (3.12) oraz drugiego ze wzorów (3.22) do definicji (3.29) pozwala otrzymać:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2} &= \sum_{\lambda, \lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2 \mathbf{k} \lambda \mathbf{k}' \lambda'} \kappa_{\mathbf{k} \lambda \mathbf{k}' \lambda'} = \\ &= \frac{g}{2L^3} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \sum_{k < k_c/2} s_{\mathbf{k} \lambda_1} u_{\mathbf{k} \lambda_1} v_{\mathbf{k} \lambda_1}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Macierz  $\Delta$  jest zatem antysymetryczna, podobnie jak tensor korelacji par  $\kappa$ . Warto zwrócić uwagę, iż  $\Delta_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 -\mathbf{k}_1, -\lambda_1}$  zależy od  $\mathbf{k}_1$  jedynie poprzez funkcję charakterystyczną przedziału  $[0, k_c/2)$ . W szczególności, dla  $\mathbf{k}_1$  o długości spoza tego przedziału tensor korelacji par zeruje się – stany o pędach przekraczających (co do wartości)  $k_c/2$  są nieskorelowane.

Elementy macierzy  $\Delta^{\mu\nu}$  są w ogólności liczbami zespolonymi. W naszym przypadku wybór odpowiedniej konwencji fazowej sprawi jednak, że będą to liczby rzeczywiste.

### 3.3.6 Energia kinetyczna $T$

W równaniach HFB (3.15) pojawia się również macierz jednocząstkowego operatora energii kinetycznej  $T^\mu_\nu$ . W bazie  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  macierz ta ma szczególnie prostą, diagonalną postać:

$$T_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}. \quad (3.31)$$

Elementy macierzy  $T^\mu_\nu$  są rzecz jasna liczbami rzeczywistymi.

### 3.3.7 Macierz energii jednokwazicząstkowych $E$

Dla porządku zapiszmy jeszcze w bazie  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  pojawiającą się po prawej stronie równań HFB diagonalną macierz  $E$ . Jej elementy na diagonalu są dodatnimi liczbami rzeczywistymi. Noszą one nazwę *energii jednokwazicząstkowych* i stąd też nazwa całej macierzy.

Skoro macierz  $E$  jest diagonalna, to możemy zapisać, iż:

$$E_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2} = E(\mathbf{k}_1 \lambda_1) \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}. \quad (3.32)$$

gdzie:  $E(\mathbf{k}_1 \lambda_1)$  jest pewną dodatnią funkcją liczb kwantowych  $\mathbf{k}_1, \lambda_1$ .

Ponieważ w dalszej części wykładu macierz  $E$  będzie się pojawiać bardzo rzadko, użycie tej samej litery na oznaczenie powyższej funkcji nie powinno prowadzić do nieporozumień.

Na zakończenie wprowadzania potrzebnych macierzy, warto nadmienić, że z ich pomocą wzór (3.21) na średnią energię w stanie iloczynowym przyjmuje szczególnie prostą postać (por. (D 9.91)):

$$E_{\text{HFB}} = \text{Tr} \left( T\rho + \frac{1}{2}\Gamma\rho - \frac{1}{2}\Delta\kappa^* \right) \quad (3.33)$$

a w notacji abstrakcyjno-wskaźnikowej:

$$E_{\text{HFB}} = T^\mu{}_\nu \rho^\nu{}_\mu + \frac{1}{2}\Gamma^\mu{}_\nu \rho^\nu{}_\mu - \frac{1}{2}\Delta^{\mu\nu} (\kappa^*)_{\nu\mu}. \quad (3.34)$$

Zapisawszy w bazie  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  wszystkie macierze pojawiające się w równaniach HFB (3.15), tj. wzory (3.8), (3.28), (3.30), (3.31) oraz (3.32), możemy przystąpić do zapisania tychże równań w tej bazie. Dokonamy tego wyraz po wyrazie.

### 3.3.8 Pierwsze równanie HFB

Wyraz  $(T + \Gamma - \mu\delta)^\mu{}_\sigma A^\sigma{}_\nu$  ma postać:

$$\sum_\lambda \sum_{\mathbf{k}} (T + \Gamma - \mu\delta)_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}\lambda} A_{\mathbf{k}\lambda \mathbf{k}_2\lambda_2} = (\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \quad (3.35)$$

gdzie wprowadzono funkcję pomocniczą:

$$\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) := \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c} v_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}, -\lambda_1}^2 \quad (3.36)$$

Wyraz  $\Delta^{\mu\pi} B_{\pi\nu}$  ma postać:

$$\sum_\lambda \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}\lambda} B_{\mathbf{k}\lambda \mathbf{k}_2\lambda_2} = \frac{g}{2L^3} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \left[ \sum_{k < k_c/2} s_{\mathbf{k}\lambda_1} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} \right] \bar{s}_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \quad (3.37)$$

Z kolei wyraz z prawej strony równania  $A^\mu{}_\rho E^\rho{}_\nu$  ma postać:

$$\sum_\lambda \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}\lambda} A_{\mathbf{k}\lambda \mathbf{k}_2\lambda_2} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \quad (3.38)$$

Wszystkie trzy wyrazy mają wspólny czynnik  $\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}$ . Równanie jest więc trywialną tożsamością dla  $\mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2$  lub  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ . Aby rozpatrzyć pozostałe przypadki, podstawmy  $\mathbf{k}_2$  równe  $\mathbf{k}_1$  oraz  $\lambda_2$  równe  $\lambda_1$ .

Pierwsze równanie HFB sprowadza się do:

$$(\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} + \frac{g}{2L^3} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \left[ \sum_{k < k_c/2} s_{\mathbf{k}\lambda_1} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} \right] \bar{s}_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \quad (3.39)$$

gdzie  $\lambda_1$  przebiega zbiór  $\{\uparrow, \downarrow\}$ , natomiast  $\mathbf{k}_1$  – zbiór  $\{\frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ .

### 3.3.9 Drugie równanie HFB

Wyraz  $-(\Delta^*)_{\mu\sigma} A^\sigma_\nu$  ma postać:

$$-\sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \bar{\Delta}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k} \lambda} A_{\mathbf{k} \lambda \mathbf{k}_2 \lambda_2} = -\frac{g}{2L^3} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \left[ \sum_{k < k_c/2} \bar{s}_{\mathbf{k} \lambda_1} u_{\mathbf{k} \lambda_1} v_{\mathbf{k} \lambda_1} \right] u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \quad (3.40)$$

Wyraz  $-(T^* + \Gamma^* - \mu\delta)_\mu^\pi B_{\pi\nu}$  ma postać:

$$-\sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} (T + \Gamma - \mu\delta)_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k} \lambda} B_{\mathbf{k} \lambda \mathbf{k}_2 \lambda_2} = (\Xi(\mathbf{k}_1 \lambda_1) - \mu) \bar{s}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \quad (3.41)$$

gdzie korzystaliśmy z tego, że macierze  $T$  i  $\Gamma$  są rzeczywiste oraz że  $u_\mu$  i  $v_\mu$  są liczbami rzeczywistymi.

Funkcja pomocnicza  $\Xi$  zdefiniowana jest wzorem (3.36).

Z kolei wyraz z prawej strony równania  $B_{\mu\rho} E^\rho_\nu$  ma postać:

$$\sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k} \lambda} B_{\mathbf{k} \lambda \mathbf{k}_2 \lambda_2} = -E(\mathbf{k}_1 \lambda_1) \bar{s}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \quad (3.42)$$

Tym razem wszystkie trzy wyrazy mają wspólny czynnik  $\delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}$ . Równanie jest więc trywialną tożsamością dla  $\mathbf{k}_1 \neq -\mathbf{k}_2$  lub  $\lambda_1 \neq -\lambda_2$ . Aby rozpatrzeć pozostałe przypadki, podstawmy  $\mathbf{k}_2$  równe  $-\mathbf{k}_1$  oraz  $\lambda_2$  równe  $-\lambda_1$ .

Drugie równanie HFB sprowadza się do:

$$-\frac{g}{2L^3} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \left[ \sum_{k < k_c/2} \bar{s}_{\mathbf{k} \lambda_1} u_{\mathbf{k} \lambda_1} v_{\mathbf{k} \lambda_1} \right] u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} + (\Xi(\mathbf{k}_1 \lambda_1) - \mu) \bar{s}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} = \quad (3.43)$$

$$= -E(\mathbf{k}_1 \lambda_1) \bar{s}_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}$$

Powyższe równanie wygodnie przemnożyć obustronnie przez  $-s_{\mathbf{k}_1 \lambda_1}$ , otrzymując:

$$\frac{g}{2L^3} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \left[ \sum_{k < k_c/2} \bar{s}_{\mathbf{k} \lambda_1} u_{\mathbf{k} \lambda_1} v_{\mathbf{k} \lambda_1} \right] s_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} u_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} - (\Xi(\mathbf{k}_1 \lambda_1) - \mu) v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} = E(\mathbf{k}_1 \lambda_1) v_{\mathbf{k}_1 \lambda_1} \quad (3.44)$$

gdzie  $\lambda_1$  przebiega zbiór  $\{\uparrow, \downarrow\}$ , natomiast  $\mathbf{k}_1$  – zbiór  $\{\frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ .

### 3.3.10 Wybór konwencji fazowej

Otrzymane przez nas równania HFB (3.39) i (3.44) można znacznie uprościć. Aby tego dokonać, dobrze jest najpierw wybrać wygodną konwencję fazową.

Ze względu na fakt, że czynniki fazowe  $s_{\mathbf{k} \lambda_1}$  pojawiają się pod sumami liczonymi po  $\mathbf{k}$ , warto przyjąć, że czynniki te nie zależą od  $\mathbf{k}$ . Co więcej, dobrze, aby czynniki fazowe były liczbami rzeczywistymi, dzięki czemu macierze  $B$  i  $\Delta$  będą rzeczywiste.

Te dwa wymogi wraz z własnością  $s_{\bar{\mu}} = -s_\mu$  ograniczają liczbę możliwych konwencji do dwóch. Pierwsza z nich stanowi, iż dla dowolnego  $\mathbf{k}$ :

$$s_{\mathbf{k}\uparrow} = s_\uparrow = 1 \quad \text{oraz} \quad s_{\mathbf{k}\downarrow} = s_\downarrow = -1 \quad (3.45)$$

Drugą możliwą konwencję uzyskuje się z powyższej przez zamianę miejscami  $\uparrow$  z  $\downarrow$ . Wybór pomiędzy tymi dwoma konwencjami jest dowolny. Tu wybierzemy konwencję (3.45).

Dzięki przyjęciu takiej konwencji fazowej, w której czynnik fazowy  $s_{\mathbf{k}\lambda_1}$  nie zależy od  $\mathbf{k}$ , w oczywisty sposób prawdziwa jest następująca tożsamość:

$$\bar{s}_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \sum_{k < k_c/2} s_{\mathbf{k}\lambda_1} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} = \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1}. \quad (3.46)$$

Zastosowanie tej tożsamości do równań HFB sprowadza je do następującej postaci:

$$(\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} + \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta(\lambda_1) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \quad (3.47)$$

$$\mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta(\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} - (\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \quad (3.48)$$

gdzie  $\lambda_1$  przebiega zbiór  $\{\uparrow, \downarrow\}$ , natomiast  $\mathbf{k}_1$  – zbiór  $\{\frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ .

Wprowadzono tu kolejną funkcję pomocniczą:

$$\Delta(\lambda_1) := \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} \right] \quad (3.49)$$

$\Delta$  oznacza tu pewną rzeczywistą funkcję współrzędnej spinowej. Jest ona równa elementowi macierzowemu  $\Delta_{\mathbf{k}_1\lambda_1 - \mathbf{k}_1, -\lambda_1}$  dla każdego  $\mathbf{k}_1$  takiego, że  $k_1 < k_c/2$ , zatem użycie tego samego symbolu nie powinno prowadzić do nieporozumień.

### 3.3.11 Konsekwencje symetrii odwrócenia spinu

Jednym z warunków, jakie narzuciliśmy na rozważany przez nas gaz fermionów jest wymóg, aby opis tego układu był niezmienniczy ze względu na zamianę kierunków spinów (por. podpunkt c) w podrozdziale 3.2). Skutkiem tego, dla każdego  $\mathbf{k}$  zachodzić będą równości:

$$u_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}\downarrow} =: u_{\mathbf{k}} \quad \text{oraz} \quad v_{\mathbf{k}\uparrow} = v_{\mathbf{k}\downarrow} =: v_{\mathbf{k}}. \quad (3.50)$$

To z kolei oznacza, że funkcje pomocnicze  $\Xi$  oraz  $\Delta$  nie będą w istocie zależeć od spinu. Ta ostatnia stanowić będzie zatem *pojedynczą liczbę rzeczywistą*, którą będziemy nazywać *szczeliną energetyczną*.

Wreszcie, zależne od wszystkich wyżej wymienionych wielkości poprzez równania HFB energie kwazicząstkowe również będą indeksowane jedynie pędem:  $E(\mathbf{k}\uparrow) = E(\mathbf{k}\downarrow) =: E_{\mathbf{k}}$ .

Równania HFB ulegną dalszemu uproszczeniu, przyjmując postać:

$$(\Xi(\mathbf{k}_1) - \mu) u_{\mathbf{k}_1} + \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta v_{\mathbf{k}_1} = E_{\mathbf{k}_1} u_{\mathbf{k}_1} \quad (3.51)$$

$$\mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta u_{\mathbf{k}_1} - (\Xi(\mathbf{k}_1) - \mu) v_{\mathbf{k}_1} = E_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} \quad (3.52)$$

co warto dla przejrzystości zapisać w postaci macierzowej<sup>9</sup>:

$$\begin{bmatrix} \Xi(\mathbf{k}_1) - \mu & \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta \\ \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta & -\Xi(\mathbf{k}_1) + \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

<sup>9</sup>W odróżnieniu od ogólnej postaci (3.14), tu elementami macierzy  $2 \times 2$  i  $2 \times 1$  są *liczby*.

gdzie:

$$\Xi(\mathbf{k}_1) := \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c} v_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}}^2 \quad (3.54)$$

$$\Delta := \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \quad (3.55)$$

Natomiast współczynnik Lagrange'a  $\mu$  zadany będzie przez warunek (por. (3.24)):

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \quad (3.56)$$

### 3.3.12 Sprowadzenie równań HFB do układu dwóch równań

Skoncentrujmy się teraz na części układu równań HFB odpowiadającej pędom o wartościach  $k_1 \geq k_c/2$ . Jako że dla takich pędów funkcja charakterystyczna w (3.53) wynosi zero, każde równanie zawierać będzie macierz diagonalną:

$$\begin{bmatrix} \Xi(\mathbf{k}_1) - \mu & 0 \\ 0 & -\Xi(\mathbf{k}_1) + \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (3.57)$$

gdzie  $\mathbf{k}_1$  tym razem przebiega zbiór  $\{\frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \setminus B(0, k_c/2)$ .

Ze względu na diagonalną postać macierzy układu oraz na warunek normalizacyjny (3.9) otrzymamy, że albo  $u_{\mathbf{k}_1} = 1$  i  $v_{\mathbf{k}_1} = 0$ , albo  $u_{\mathbf{k}_1} = 0$  i  $v_{\mathbf{k}_1} = 1$ . Innymi słowy, stany o wartości pędu wyższej niż połowa pędu obciążenia są albo całkowicie nieobsadzone, albo całkowicie obsadzone.

To, która z tych możliwości zachodzi dla konkretnego stanu bazy pędowej, jest zdeterminowane (od strony matematycznej) warunkiem dodatniości energii jednokwazi-cząstkowych. Dla każdego  $\mathbf{k}_1$ , musimy wziąć  $E_{\mathbf{k}_1}$  równą tej z wartości własnych  $\pm(\Xi(\mathbf{k}_1) - \mu)$ , która jest większa od zera.

Wartość  $\Xi(\mathbf{k}_1) - \mu$  możemy ograniczyć zarówno z góry jak i z dołu, albowiem skoro:

$$\sum_{k < k_c} v_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}}^2 \leq \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{N}{2} \quad (3.58)$$

gdzie sumę po podzbiornie stanów bazy ograniczono z góry przez sumę rozciągniętą na wszystkie stany bazy, po czym skorzystano z (3.56), to stąd otrzymujemy, że:

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{|g|n}{4} - \mu \leq \Xi(\mathbf{k}_1) - \mu \leq \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{|g|n}{4} - \mu \quad (3.59)$$

gdzie wprowadzono średnią koncentrację cząstek w układzie:

$$n := \frac{N}{L^3} \quad (3.60)$$

Dla  $k_1 \geq k_c/2$  ograniczenie dolne w (3.59) możemy uniezależnić od  $k_1$ :

$$\Xi(\mathbf{k}_1) - \mu \geq \frac{\hbar^2 k_c^2}{8m} - \frac{|g|n}{4} - \mu \quad (3.61)$$

Przywołajmy warunek (2.12) stanowiący, że  $k_c$  jest „duże”. Wzmocnijmy go teraz żądaniem, by:

$$\frac{\hbar^2 k_c^2}{8m} - \frac{|g|n}{4} - \mu > 0 \quad (3.62)$$

przy czym należy pamiętać, że stała sprzężenia  $g$  związana jest z  $k_c$  wzorem (2.51).

Na mocy tego warunku oraz obu wymienionych powyżej ograniczeń (3.59), (3.61) otrzymujemy dwa wnioski dotyczące pędów  $\mathbf{k}_1$  takich, że  $k_1 \geq k_c/2$ .

Po pierwsze, energie jednokwazicząstkowe ograniczają się przez:

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{|g|n}{4} - \mu \leq E_{\mathbf{k}_1} \leq \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{|g|n}{4} - \mu \quad (3.63)$$

Po drugie, zachodzi:  $u_{\mathbf{k}_1} = 1$  i  $v_{\mathbf{k}_1} = 0$ . Innymi słowy, stany jednocząstkowe o wartościach pędu przekraczających połowę pędu obciążenia są całkowicie nieobsadzone; kula pędowa  $B(0, k_c/2)$  zawiera wszystkie stany o niezerowym prawdopodobieństwie obsadzenia  $v_{\mathbf{k}_1}^2$ .

Ten ostatni fakt ma dalsze konsekwencje upraszczające nasze obliczenia. Zauważmy, że gdy za chwilę przejdziemy do rozważania równań HFB dla  $k_1 < k_c/2$ , będziemy mogli położyć:

$$\sum_{k < k_c} v_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}}^2 = \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{N}{2} \quad (3.64)$$

Jest tak, gdyż kula pędowa  $B(\mathbf{k}_1, k_c)$  zawiera w sobie całą kulę pędową  $B(0, k_c/2)$  dla dowolnego  $\mathbf{k}_1$  spełniającego  $k_1 < k_c/2$ . Innymi słowy, suma z lewej strony powyższego ciągu równości zawiera już wszystkie niezerowe przyczynki. Z kolei druga równość to nic innego jak (3.56).

Rozważmy więc teraz tę część układu równań HFB, która odpowiada pędom o wartości  $k_1 < k_c/2$ . Na mocy równości (3.64) mamy, iż:

$$\Xi(\mathbf{k}_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma \quad (3.65)$$

gdzie wprowadzono oznaczenie:

$$\Gamma := -\frac{gn}{4}. \quad (3.66)$$

Tu  $\Gamma$  stanowi zatem pojedynczą liczbę rzeczywistą. Użycie tego samego oznaczenia co dla jednocząstkowego potencjału średniopolewego nie powinno prowadzić do nieporozumień, podobnie jak nie budzi go używanie znaku  $\Delta$  na oznaczenie zarówno szczeliny energetycznej, jak i wcześniej potencjału korelacji par.

Możemy teraz w zwarty sposób zapisać równania HFB dla pędów o wartości  $k_1 < k_c/2$ :

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu & \Delta \\ \Delta & -\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (3.67)$$

gdzie  $\mathbf{k}_1$  tym razem przebiega zbiór  $\{\frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \cap B(0, k_c/2)$ .

Macierz powyższego układu ma wartości własne równe  $\pm\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2}$ . Z definicji, energia kwazicząstkowa  $E_{\mathbf{k}_1}$  jest równa tej większej od zera:

$$E_{\mathbf{k}_1} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2} \quad (3.68)$$

Natychmiast można więc zapisać równania na  $u_{\mathbf{k}_1}$  oraz  $v_{\mathbf{k}_1}$ :

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}_1} &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu}{2E_{\mathbf{k}_1}}} \\ v_{\mathbf{k}_1} &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu}{2E_{\mathbf{k}_1}}} \end{aligned} \quad (3.69)$$

Niestety, równanie (3.67) nie jest równaniem własnym, ponieważ szczelina energetyczna  $\Delta$  zależy od  $u_{\mathbf{k}}$  i  $v_{\mathbf{k}}$  indeksowanych  $\mathbf{k}$  takimi, że  $k < k_c/2$ . W konsekwencji, we wzorach (3.69) współczynniki  $u_{\mathbf{k}}$  i  $v_{\mathbf{k}}$  znajdują się również po prawej stronie - ukryte w  $E_{\mathbf{k}_1}$ . Wzory te nie są więc jeszcze rozwiązaniem, ale dopiero zadają nieliniowy układ równań na wartości tych współczynników.

Układ ten można jednak rozprząc, sprowadzając go do pojedynczego nieliniowego równania na  $\Delta$ , zwanego w literaturze *równaniem szczeliny energetycznej* (ang. *gap equation* [9, 15, 22]).

W tym celu przemnożmy stronami wzory (3.69) i skorzystajmy z (3.68):

$$u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} = \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2}{4E_{\mathbf{k}_1}^2}} = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}_1}} \quad (3.70)$$

Podstawiając powyższą równość do definicji szczeliny energetycznej (3.55), otrzymujemy, iż:

$$\Delta = \frac{g}{4L^3} \Delta \sum_{k < k_c/2} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \quad (3.71)$$

Trywialnym rozwiązaniem powyższego równania jest  $\Delta = 0$ , opisujące fazę normalną gazu fermionów. Jest to jedyne rozwiązanie w przypadku układu cząstek nieoddziałujących ( $g = 0$ ).

W przypadku, gdy  $\Delta \neq 0$ , podzielmy równanie (3.71) przez  $\frac{g\Delta}{4L^3}$ :

$$\frac{4L^3}{g} = \sum_{k < k_c/2} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \quad (3.72)$$

Powyższy wzór to właśnie zapowiadane równanie szczeliny energetycznej<sup>10</sup>. W rzeczywistości zawiera ono, oprócz  $\Delta$ , jeszcze jedną niewiadomą: potencjał chemiczny  $\mu$ .

<sup>10</sup>Sama  $\Delta$  ukryta jest w  $E_{\mathbf{k}}$ , patrz wzór (3.68).

Drugim równaniem, które wespół z powyższym całkowicie zdeterminują rozwiązanie równań HFB, jest oczywiście warunek (3.56) stałej liczby cząstek. Przekształćmy go teraz do postaci niezawierającej  $v_{\mathbf{k}_1}$ :

$$N = 2 \sum_{k < k_c/2} v_{\mathbf{k}}^2 = \sum_{k < k_c/2} \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (3.73)$$

gdzie skorzystano z drugiego ze wzorów (3.69) oraz ograniczono się do sumowania po kuli pędowej  $B(0, k_c/2)$  (por. dyskusja po (3.64)). Równanie to nazywać będziemy po prostu *równaniem stałej liczby cząstek*<sup>11</sup>.

Równania (3.72) oraz (3.73) tworzą nieliniowy układ równań z dwiema niewiadomymi:  $\Delta$  i  $\mu$ . Po jego rozwiązaniu, możemy uzyskać wartości wszystkich współczynników  $u_{\mathbf{k}}$  i  $v_{\mathbf{k}}$  posługując się wzorami (3.69).

### 3.3.13 Przejście graniczne $L \rightarrow +\infty$

Nadszedł odpowiedni moment, aby wydostać nasz układ z pudełka i na powrót posługiwać się ciągłą bazą stanów jednocząstkowych. Przepiszmy równania (3.72) i (3.73), przemnoższy je jeszcze przez  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ :

$$\frac{32\pi^3}{g} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_{k < k_c/2} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \quad (3.74)$$

$$8\pi^3 n = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sum_{k < k_c/2} \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (3.75)$$

gdzie  $n$  to średnia koncentracja cząstek (3.60).

Dokonajmy teraz przejścia granicznego  $L \rightarrow +\infty$  zgodnie z przepisem (3.5), zachowując jednak stałą koncentrację cząstek  $n$  w układzie. Jest rzeczą zrozumiałą, że w jednorodnym i nieskończonym układzie to właśnie ta wielkość będzie miarą nagromadzenia cząstek, a nie (nieskończona!) liczba cząstek  $N$ .

Otrzymujemy:

$$\frac{32\pi^3}{g} = \int_{k < k_c/2} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} d^3\mathbf{k} \quad (3.76)$$

$$8\pi^3 n = \int_{k < k_c/2} \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) d^3\mathbf{k} \quad (3.77)$$

Definicja  $\Gamma$  (3.66), a także wzory na  $E_{\mathbf{k}}$  (3.68) oraz  $u_{\mathbf{k}}$  i  $v_{\mathbf{k}}$  (3.69) nie ulegają zmianie w wyniku dokonanego przez nas przejścia granicznego.

<sup>11</sup>W literaturze [15] można spotkać się ze skrótową nazwą *number equation*.



### 3.3.14 Symetria obrotowa i jej konsekwencje

Zwróćmy uwagę, że po prawej stronie równania (3.68) nie pojawia się  $\mathbf{k}_1$ , tylko  $k_1^2$ . Oznacza to, że w rzeczywistości energie kwazicząstkowe zależą jedynie od długości indeksującego je wektora pędu. W konsekwencji, na mocy wzorów (3.69), to samo dotyczy także współczynników  $u_{\mathbf{k}}$  i  $v_{\mathbf{k}}$ :

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}_1} &= E_{k_1} \\ u_{\mathbf{k}_1} &= u_{k_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} &= v_{k_1} \end{aligned} \quad (3.78)$$

Z fizycznego punktu widzenia oznacza to, iż rozwiązanie samozgodne równań HFB dla badanego przez nas układu ma symetrię obrotową. Wyniku tego należało się spodziewać – zarówno operator energii kinetycznej, jak i operator zapostulowanego przez nas oddziaływania efektywnego odznaczają się tą symetrią. Co więcej, rozważamy przecież układ jednorodny.

Fakt ten ma istotne znaczenie rachunkowe. Teraz możemy bowiem zamienić całki w równaniach (3.76) i (3.77) z trójwymiarowych na jednowymiarowe. Po podstawieniu pod  $g$  wzoru (2.51) i wykonaniu kilku przekształceń otrzymujemy:

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{m}{\hbar^2} \left( k_c - \frac{\pi}{a} \right) = \int_0^{k_c/2} \frac{1}{E_k} k^2 dk \quad (3.79)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k} + \Gamma - \mu \right) k^2 dk \quad (3.80)$$

gdzie:  $\Gamma := -\frac{2\pi^2 \hbar^2 n}{m(k_c - \pi/a)}$ .

Z pewnych powodów, które staną się jasne w dalszej części wykładu, pierwsze z powyższych równań zapiszemy nieco inaczej. Przemnożymy je mianowicie obu stronami przez  $-\frac{\hbar^2}{2m}$  oraz zamienimy  $k_c$  stojące po lewej stronie (3.79) na  $2 \int_0^{k_c/2} dk$ , którą to całkę przenieśmy na prawą stronę.

Ostatecznie, równanie szczeliny energetycznej zapiszemy w postaci:

$$\frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k} \right) dk \quad (3.81)$$

## 3.4 Podsumowanie: rozwiązanie równań HFB oraz funkcjonal energii.

Na koniec tego rozdziału przedstawmy najważniejsze dotychczasowe wyniki dotyczące rozwiązania równań HFB (3.15) dla jednorodnego rozrzedzonego gazu fermionów. Tam, gdzie nie zrobiliśmy tego do tej pory, dokonujemy formalnego przejścia z  $L \rightarrow +\infty$ . W szczególności, wymaga to zastąpienia delt Kroneckera odpowiednimi deltami Diraca.

Parametrami wejściowymi są:

- $n$  – koncentracja cząstek w układzie;
- $m$  – masa pojedynczej cząstki;
- $a$  – długość rozpraszania charakteryzująca oddziaływanie międzycząstkowe;
- $k_c$  – pęd obciążenia specyfikujący efektywny potencjał tego oddziaływania.

Rozważania rozproszeniowe w podrozdziale 2.3 doprowadziły nas do związku (2.51) pomiędzy powyższymi parametrami a stałą sprzężenia  $g$  zawartą w efektywnym potencjale oddziaływania (2.8):

$$g = \frac{8\pi^2\hbar^2}{m\left(k_c - \frac{\pi}{a}\right)} \quad (3.82)$$

Dzięki symetriom, jakie narzuciliśmy rozwiązaniu samozgodnemu w podrozdziale 3.2, zidentyfikowaliśmy jego bazę kanoniczną. Jest nią baza pędowo-spinowa  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ . Rozwiązanie samozgodne okazało się posiadać też symetrię obrotową, która sprawia, że wielkości mające znaczenie fizyczne są indeksowane jedynie przez długość wektora pędu  $k$ , a nie komplet czterech liczb kwantowych charakteryzujących każdy stan jednocząstkowy tej bazy.

I tak, szukane w równaniach HFB macierze  $A$  i  $B$  można zapisać w postaci (por. (3.13)):

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2} &= u_k \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \\ B_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2} &= -s_{\lambda_1} v_k \delta^3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \end{aligned} \quad (3.83)$$

gdzie w myśl przyjętej przez nas konwencji fazowej (3.45), czynnik fazowy  $s_\lambda$  indeksowany jest jedynie przez kierunek spinu:

$$s_\uparrow = 1 \quad \text{oraz} \quad s_\downarrow = -1 \quad (3.84)$$

Współczynniki  $u_k$  i  $v_k$  są postaci (por. (3.69)):

$$\begin{aligned} u_k &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\hbar^2 k^2 + \Gamma - \mu}{2m \cdot 2E_k}} & \text{dla } k < \frac{k_c}{2} \\ 1 & \text{dla } k \geq \frac{k_c}{2} \end{cases} \\ v_k &= \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\hbar^2 k^2 + \Gamma - \mu}{2m \cdot 2E_k}} & \text{dla } k < \frac{k_c}{2} \\ 0 & \text{dla } k \geq \frac{k_c}{2} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.85)$$

gdzie:

$\Gamma$  ma sens wartości stałego, jednocząstkowego potencjału średniopolowego i wyraża się wzorem (3.66):

$$\Gamma := -\frac{gn}{4} = -\frac{2\pi^2\hbar^2 n}{m\left(k_c - \frac{\pi}{a}\right)}; \quad (3.86)$$

$E_k$  stanowi energię jednokwazicząstkową odpowiadającą każdemu stanowi bazowemu o wektorze pędu długości  $k$ . Dla  $k < k_c/2$  wyraża się ona wzorem (por. (3.68)):

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2}. \quad (3.87)$$

Energie jednokwazicząstkowe indeksowane przez  $k \geq k_c/2$  mają bardziej skomplikowaną postać<sup>12</sup>. Jest wszakże prawdą, że dla  $k \geq k_c/2$  zachodzi (3.63):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - |\Gamma| - \mu \leq E_k \leq \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + |\Gamma| - \mu \quad (3.88)$$

Z kolei  $\Delta$  i  $\mu$  mają sens tzw. szczeliny energetycznej oraz potencjału chemicznego. Wzór (3.87) stanowi doskonałe uzasadnienie nazwy pierwszej z tych dwu wielkości. Albowiem  $\Delta$ , jako minimum funkcji  $E_k$ , opisuje szerokość „szczeliny” między krzywą widma jednokwazicząstkowego<sup>13</sup> a osią  $k$ .

Matematycznie, para  $\Delta, \mu$  stanowi rozwiązanie poniższego nieliniowego układu dwóch równań (3.81), (3.80):

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left(1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k}\right) dk \quad (3.89)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left(1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k} + \Gamma - \mu\right) k^2 dk \quad (3.90)$$

Zwróćmy uwagę, że przy takiej formie zapisu powyższych równań, z formalnego punktu widzenia nic nie stoi na przeszkodzie, aby przejść z  $k_c$  do nieskończoności<sup>14</sup>. Pęd obcięcia znajduje się w nich bowiem jedynie w górnych granicach całkowania oraz w definicji  $\Gamma$  (3.86). Stanowi to zwieńczenie procedury renormalizacji, która polegała na wprowadzeniu  $k_c$  celem uniknięcia problemów obliczeniowych związanych z nieskończonościami. Rezygnuje się z niego dopiero pod koniec wyprowadzenia, gdy nie grożą już żadne matematyczne trudności.

Aby dokonać przejścia granicznego  $k_c \rightarrow +\infty$ , wystarczy obie całki zmienić na niewłaściwe oraz przyjąć, że  $\Gamma = 0$ :

$$\frac{\pi}{2a} \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \int_0^{+\infty} \left(1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k}\right) dk \quad \text{oraz} \quad 2\pi^2 n \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \int_0^{+\infty} \left(1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k} - \mu\right) k^2 dk \quad (3.91)$$

W Dodatku (Rozdział 6) pokażemy, że powyższe całki niewłaściwe są zbieżne.

W dalszej części pracy pozostaniemy jednakże przy „dużej”, ale skończonej wartości  $k_c$ . Dzięki temu równania (3.89)-(3.90)<sup>15</sup> będziemy w stanie bez większych problemów rozwiązać numerycznie (Rozdział 5).

<sup>12</sup>Ma to związek z niemożnością skorzystania z (3.64).

<sup>13</sup>Por. Rys. 5.5.

<sup>14</sup>Tak też się zresztą czyni w literaturze (por. [9, 15]).

<sup>15</sup>A także ich uogólnienia na niezerowe temperatury, patrz Rozdział 4.

Nadmieńmy, iż równania (3.91) (nieco inaczej zapisane) po raz pierwszy podał Leggett w roku 1980 [9]. Por. również równania (54),(55) w [12].

Pozostałe pojawiające się w równaniach HFB macierze są postaci:

- Hermitowska macierz gęstości:

$$\rho_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = v_{k_1}^2 \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (3.92)$$

- Antysymetryczny tensor korelacji par:

$$\kappa_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = -s_{\lambda_1} u_{k_1} v_{k_1} \delta^3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}, \quad (3.93)$$

- Jednocząstkowy potencjał średniopolowy (dla  $k_1 < k_c/2$ )<sup>16</sup>:

$$\Gamma_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = \Gamma \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (3.94)$$

- Potencjał korelacji par:

$$\Delta_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = s_{\lambda_1} \Delta \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \delta^3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}, \quad (3.95)$$

- Macierz energii kinetycznej:

$$T_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (3.96)$$

- Macierz energii jednokwazicząstkowych:

$$E_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = E_{k_1} \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \quad (3.97)$$

Podane powyżej wzory wykorzystamy teraz, aby przekształcić ogólny wzór (3.33) na wartość oczekiwaną hamiltonianu do prostszej postaci, którą wygodnie będzie się posługiwać w konkretnych obliczeniach.

Wzór (3.33) rozpiszmy wprawdzie dla układu zamkniętego w sześciennym pudełku o boku  $L$ , tj. posługując się taką dyskretną bazą pędowo-spinową, jakiej używaliśmy w ciągu niemal całego tego rozdziału. Po żmudnych, ale prostych przekształceniach możemy otrzymać, iż:

$$E_{\text{HFB}} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k < k_c/2} \left[ k^2 \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2 + \Gamma - \mu}{E_k} \right) \right] - \frac{2L^3}{g} (\Gamma^2 + \Delta^2) \quad (3.98)$$

Dzieląc powyższe równanie obustronnie przez  $L^3$  sprowadzimy je do postaci, w której możliwe będzie formalne przejście  $L \rightarrow +\infty$  zgodnie z przepisem (3.5). Po lewej stronie pojawi się średnia gęstość energii dla rozwiązania samozgodnego:

$$\epsilon_{\text{HFB}} := E_{\text{HFB}}/L^3 \quad (3.99)$$

<sup>16</sup>Elementy na diagonalu indeksowane dłuższymi wektorami pędu są bardziej skomplikowane.

Dokonując teraz przejścia granicznego podobnie jak czynione to było w podrozdziale 3.3.14 oraz sprowadzając uzyskaną w ten sposób całkę do całki jednowymiarowej, otrzymujemy:

$$\epsilon_{\text{HFB}} = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \int_0^{k_c/2} \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu}{E_k} \right) k^4 dk - \frac{2}{g} (\Gamma^2 + \Delta^2) \quad (3.100)$$

Również w tym wyrażeniu można dokonać formalnego przejścia granicznego  $k_c \rightarrow +\infty$ . Wymaga to jednak ostrożnego przekształcenia (3.100) tak, aby uzyskana całka niewłaściwa była zbieżna. Szukana postać jest następująca:

$$\epsilon_{\text{HFB}} \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \frac{m\Delta^2}{4\pi^2 \hbar^2 a} + \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \int_0^{+\infty} \left[ \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu}{E_k} \right) k^4 - \frac{2m^2 \Delta^2}{\hbar^4} \right] dk \quad (3.101)$$

Tak jak w (3.91), wartość  $\Gamma$  w granicy wynosi 0. Zbieżność pojawiającej się tu całki niewłaściwej udowodnimy w Dodatku.

## Rozdział 4

# Uogólnienie metody HFB na $T > 0$ – metoda FTHFB

Poprzedni rozdział traktował wyłącznie o rozrzedzonym gazie fermionów w temperaturze zera bezwzględnego. Okazuje się wszakże, że metodę HFB można bardzo łatwo uogólnić na temperatury  $T > 0$ . Uogólnienie to znane jest jako metoda *Finite Temperature HFB* (FTHFB).

Metoda ta pozwala w szczególności badać zależność temperaturową takich wielkości jak szczelina energetyczna  $\Delta(T)$ , potencjał chemiczny  $\mu(T)$  czy gęstość energii wewnętrznej  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$ . Będziemy przy tym zakładać, że nie wychodzimy poza reżim niskoenergetycznego rozpraszania (czyli wciąż obowiązuje teoria efektywna wyłożona w Rozdziale 2). Przyjmijmy też, że średnia gęstość cząstek  $n$  nie zmienia się z temperaturą.

Zapisanie uogólnionych równań HFB – tzw. *równań FTHFB* dla badanego przez nas układu stanowi cel niniejszego rozdziału. Opierać się tu będziemy na pracy Goodmana [14]. Kilkukrotnie odwołamy się do podanych (i wyprowadzonych) tam wzorów, przy czym odpowiednie odnośniki będą postaci (G <nr wzoru w [14]>).

Również w tym rozdziale posługiwać się będziemy notacją abstrakcyjno-wskaźnikową, wprowadzoną w podrozdziale 3.1.1.

### 4.1 Metoda FTHFB

W tym podrozdziale poczynimy kilka wstępnych uwag na temat metody FTHFB – podobnie jak uczyniliśmy to w podrozdziale 3.1.3 dla metody HFB. Omówimy też pokrótce istotne dla nas fragmenty pracy Goodmana [14].

Na potrzeby wyprowadzenia równań FTHFB, ponownie umieszczamy rozważany układ w sześciennym pudełku o boku  $L$ . Innymi słowy, jednocząstkowa baza pędowo-spinowa  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ , jaką się posłużymy, na czas wyprowadzenia będzie bazą dyskretną. W pierwszej części wyprowadzenia będziemy też używać ogólnej bazy jednocząstkowej  $|\mu\rangle$ , o której założymy jedynie, że macierz energii jednokwazicząstkowych  $E$  jest w niej diagonalna (por. przypis 3 na s. 29).

Wykorzystana przez nas w poprzednim rozdziale metoda HFB dotyczyła układu w temperaturze zera bezwzględnej, toteż jedynym stanem układu, jaki był istotny w jego opisie, był stan podstawowy. Stan ten, jak pamiętamy, aproksymowany był pewnym stanem iloczynowym, tj. próżnią pewnej rodziny operatorów anihilacji  $\alpha_\mu$  związanych z operatorami kreacji-anihilacji „prawdziwych” fermionów transformacją Bogolubowa (3.6). Macierze tej transformacji otrzymywane były z (warunkowej) minimalizacji wartości oczekiwanej hamiltonianu (3.21). Ten szczególny stan iloczynowy nazwaliśmy *rozwiązaniem samozgodnym*.

Również metoda FTHFB aproksymuje stan podstawowy układu stanem iloczynowym. Macierze determinującej go transformacji Bogolubowa wyznaczone w niej są tym razem poprzez warunkową minimalizację wielkiego potencjału kanonicznego  $\Omega$ . Ten szczególny stan również nazywać będziemy rozwiązaniem samozgodnym. Ponieważ metoda FTHFB w zasadzie zawiera w sobie metodę HFB, nie powinno to prowadzić do nieporozumień.

Ponieważ rozszerzamy nasze rozważania na niezerowe temperatury ( $T > 0$ ), istotne w opisie staną się stany wzbudzone. Przyjmujemy, że widmo wzbudzeń układu zdeterminowane jest przez te same kwazicząstkowe operatory kreacji-anihilacji:  $\alpha_\mu^+$ ,  $\alpha_\mu$ , których próżnią jest rozwiązanie samozgodne w danej temperaturze.

Mówiąc ściślej, za Goodmanem (G 3.1) przyjmujemy, że operator  $\hat{H} - \mu\hat{N}$  jest *dobrze aproksymowany* hamiltonianem układu swobodnych kwazicząstek:

$$\hat{H} - \mu\hat{N} \approx E_0 - \mu N + \sum_{\mu} E_{\mu} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\mu} \quad (4.1)$$

gdzie:  $E_0$  to energia rozwiązania samozgodnego,  $N$  stanowi (ustaloną) liczbę cząstek w układzie  $N := nL^3$ , natomiast  $E_{\mu}$  to wartość energii jednokwazicząstkowej<sup>1</sup> otrzymywana (jak się wkrótce przekonamy) z równań FTHFB, odpowiadająca stanowi bazy jednocząstkowej  $\mu$ .

Powyższa przybliżona równość staje się ścisła dla kwantowej<sup>2</sup> wartości średniej obliczanej dla rozwiązania samozgodnego.

Wprowadziwszy powyższy przybliżony hamiltonian, Goodman zapisuje za jego pomocą operator gęstości wielkiego rozkładu kanonicznego  $\hat{D}_{\text{HFB}}$  (G 3.3). Po kilku przekształceniach, w których doniosłe znaczenie ma fakt, że kwazicząstki są fermionami (por. (3.7)), operator ten udaje się sprowadzić do postaci (por. (G 3.11) i (G 3.5)):

$$\hat{D}_{\text{HFB}} = \prod_{\mu} [f_{\mu} \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\mu} + (1 - f_{\mu}) (1 - \alpha_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\mu})] \quad (4.2)$$

gdzie funkcja pomocnicza<sup>3</sup>:

$$f_{\mu} := \left[ 1 + \exp\left(\frac{E_{\mu}}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (4.3)$$

ma sens prawdopodobieństwa obsadzenia stanu jednokwazicząstkowego o energii  $E_{\mu}$  w temperaturze  $T$ . Jak należało się spodziewać, mamy tu do czynienia ze statystyką

<sup>1</sup>Rodzinie energii jednokwazicząstkowych  $\{E_{\mu}\}$  można zatem nadać fizyczną interpretację przybliżonego widma wzbudzeń układu oddziałujących fermionów.

<sup>2</sup>Tzn. *nie* po zespole statystycznym.

<sup>3</sup>Nie ma ona żadnego związku z amplitudą rozpraszania, oznaczoną również przez  $f$ !

Fermiego-Diraca. Zauważmy, iż dla  $T = 0$  mamy  $f_\mu = 0$  dla wszystkich  $\mu$ . Innymi słowy, w zerowej temperaturze układ jest w stanie kwazicząstkowej próżni, co jest całkowicie zgodne z naszymi oczekiwaniami.

W dalszej części wykładu, odwrotność iloczynu stałej Boltzmana  $k_B$  i temperatury  $T$  będziemy oznaczać przez  $\beta$ :

$$\beta := \frac{1}{k_B T} \quad (4.4)$$

Posługując się wzorem (4.2) oraz odwrotną transformacją Bogolubowa, Goodman podaje wzory<sup>4</sup> (G 3.17)-(G 3.20) na macierze gęstości  $\rho$  i  $\kappa^5$  dla niezerowych temperatur:

$$\begin{aligned} \rho^\mu_\nu &= A^\mu_\sigma (F^T)^\sigma_\pi (A^+)^\pi_\nu + (B^*)^{\mu\sigma} (\delta - F)_\sigma^\pi (B^T)_{\pi\nu}, \\ \kappa^{\mu\nu} &= A^\mu_\sigma (F^T)^\sigma_\pi (B^+)^\pi_\nu + (B^*)^{\mu\sigma} (\delta - F)_\sigma^\pi (A^T)_{\pi\nu}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

gdzie  $F$  formalnie stanowi funkcję macierzy energii jednokwazicząstkowych  $E$  daną wzorem o strukturze identycznej z (4.3):

$$F := \left[ 1 + \exp\left(\frac{1}{k_B T} E\right) \right]^{-1} \quad (4.6)$$

Ponieważ jednak macierz  $E$  jest w naszej bazie diagonalna, taka też będzie macierz  $F$ , przy czym:

$$F_{\mu\nu} = f_\mu \delta_{\mu\nu} \quad (4.7)$$

Warto zwrócić uwagę, że dla  $T = 0$  wzory (4.5) przechodzą do postaci znanej z metody HFB (3.17).

Jak dowodzi Goodman w dalszej części swojej pracy, wzory (4.5) na macierze gęstości stanowią jedyną formalną modyfikację metody HFB wymaganą w celu uwzględnienia niezerowych temperatur. W szczególności, identyczną postać mają definicje jednocząstkowego potencjału średniopolowego  $\Gamma$  (3.27) oraz potencjału korelacji par  $\Delta$  (3.29). Także liczba cząstek wiąże się z macierzą  $\rho$  znanym z poprzedniego rozdziału wzorem (3.18). Z kolei energia wewnętrzna układu wyraża się wzorem analogicznym do (3.33):

$$E_{\text{FTHFB}}(T) = \text{Tr} \left[ T_{\text{kin}} \rho(T) + \frac{1}{2} \Gamma(T) \rho(T) - \frac{1}{2} \Delta(T) \kappa^*(T) \right] \quad (4.8)$$

gdzie oznaczeniu macierzy energii kinetycznej przydano indeks „kin”, aby uniknąć konfliktu z oznaczeniem temperatury.

Należy pamiętać, że macierze gęstości oraz, w konsekwencji, wszystkie inne zależne od nich macierze zależą tu od temperatury  $T$ . Dobitnie ukazano to w powyższym wyrażeniu, jakkolwiek zazwyczaj pomijając będziemy podkreślanie tej zależności, aby nie zaciemniać wzorów.

Dla  $T = 0$  wzór (4.8) przechodzi w (3.33). Jest to zrozumiałe, albowiem w temperaturze zera bezwzględnego wszystkie „kopie” układu składające się na zespół statystyczny są w stanie podstawowym, toteż energia wewnętrzna jest ściśle równa energii tego

<sup>4</sup>Macierze  $U, V$ , którymi posługuje się Goodman, związane są z macierzami  $A, B$  relacjami:  $A = U^T$  oraz  $B = V^T$ .

<sup>5</sup>Antysymetryczny tensor korelacji par  $\kappa$  w [14] oznaczany jest przez  $t$ .



właśnie stanu. Należy wszakże mieć na uwadze, że dla każdej niezerowej temperatury:  $E_{\text{FTHFB}} \neq E_0$ . Energia stanu podstawowego wynikająca z równań FTHFB nie będzie nas jednak interesować jako niemierzalna.

W Rozdziale 4. swojego artykułu Goodman wyprowadza równania FTHFB, przyrównując do zera wariację wielkiego potencjału termodynamicznego  $\Omega$ . Potencjał ten osiąga bowiem minimum dla układu izolowanego mechanicznie oraz o stałej temperaturze  $T$  i potencjale chemicznym  $\mu$  (por. (G 2.6) oraz dyskusja doń wiodąca).

Drobiazgowa argumentacja Goodmana prowadzi do bardzo ważnego dla nas wyniku (G 4.34)-(G 4.36): *równania FTHFB mają identyczną strukturę jak równania HFB* (3.14) lub, równoważnie (3.15).

$$\begin{aligned} (T_{\text{kin}} + \Gamma - \mu\delta)^\mu_\sigma A^\sigma_\nu + \Delta^{\mu\pi} B_{\pi\nu} &= A^\mu_\rho E^\rho_\nu \\ -(\Delta^*)_{\mu\sigma} A^\sigma_\nu - (T_{\text{kin}}^* + \Gamma^* - \mu\delta)^\pi_\mu B_{\pi\nu} &= B_{\mu\rho} E^\rho_\nu \end{aligned} \quad (4.9)$$

Tak jak poprzednio,  $\mu$  jest współczynnikiem Lagrange'a mającym sens fizyczny potencjału chemicznego. Jego wartość zdeterminowana będzie dodatkowym warunkiem związanym z ustaloną liczbą cząstek  $N$ , jaki podamy w dalszej części wykładu.

Należy zwrócić uwagę, że równania FTHFB, mimo pełnej strukturalnej analogiczności do równań HFB, są od nich znacznie silniej uwikłane. Prawdopodobieństwa obsadzeń stanów jednokwazicząstkowych  $f_\mu$  zależą zarówno od  $T$ , jak i od  $E_\mu$ . Energie jednokwazicząstkowe pojawiają się zatem zarówno jawnie po prawej stronie powyższych równań, jak i po stronie lewej, ukryte w  $\Gamma$  oraz  $\Delta$ . Należy się również spodziewać, że  $E_\mu$  zależy od  $T$  dla każdego indeksu jednokwazicząstkowego  $\mu$ .

Co ciekawe, mimo skomplikowanej postaci równań FTHFB okaże się, że w przypadku badanego przez nas rozrzedzonego gazu fermionów ulegną one daleko idącemu uproszczeniu. Ostatecznie pozwoli to sprowadzić je do nieliniowego układu dwóch równań, podobnego do tych uzyskanych w podrozdziale 3.3.14. Jest to przedmiotem kolejnego podrozdziału.

## 4.2 Równania FTHFB dla rozrzedzonego gazu fermionów

### 4.2.1 Wybór bazy. Macierze $A$ i $B$ .

Zakładamy, że badany przez nas układ zachowuje wszystkie cztery symetrie wymienione w podrozdziale 3.2 w dowolnej niezerowej temperaturze. Oznacza to w szczególności, że tak jak poprzednio baza pędowo-spinowa  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$  jest bazą kanoniczną rozwiązania samozgodnego oraz:  $|\widetilde{\mathbf{k}}\lambda\rangle = |-\mathbf{k}, -\lambda\rangle$ .

Macierze współczynników transformacji Bogolubowa  $A$ ,  $B$  mają zatem identyczną postać jak poprzednio, tj. (por. (3.13)):

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \\ B_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= -\bar{s}_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Współczynniki  $u_{\mathbf{k}_1\lambda_1}$ ,  $v_{\mathbf{k}_1\lambda_1}$  oraz czynnik fazowy  $s_{\mathbf{k}_1\lambda_1}$  posiadają wszystkie własności opisane w podrozdziale 3.1.3.

### 4.2.2 Macierze gęstości $\rho$ i $\kappa$

Aby obliczyć elementy hermitowskiej macierzy gęstości  $\rho$  oraz antysymetrycznego tensora korelacji par  $\kappa$  dla badanego układu w niezerowej temperaturze, podstawmy (4.10) do wzorów Goodmana (4.5). Postępując podobnie jak w (3.22), otrzymamy:

$$\begin{aligned}\rho_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= [u_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^2 f_{\mathbf{k}_1\lambda_1} + v_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^2 (1 - f_{-\mathbf{k}_1,-\lambda_1})] \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} = \\ &= [v_{\mathbf{k}_1\lambda_1}^2 (1 - f_{\mathbf{k}_1\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}_1,-\lambda_1}) + f_{\mathbf{k}_1\lambda_1}] \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2}, \\ \kappa_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} &= -s_{\mathbf{k}_1\lambda_1} v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} (1 - f_{\mathbf{k}_1\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}_1,-\lambda_1}) \delta_{\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1,-\lambda_2}\end{aligned}\quad (4.11)$$

gdzie w pierwszym ze wzorów skorzystano z warunku normalizacyjnego (3.9), aby sprowadzić go do wygodniejszej postaci.

W niezerowej temperaturze prawdopodobieństwo obsadzenia jednocząstkowego stanu bazy kanonicznej ulega pewnemu skomplikowaniu. Istotnie, element diagonalny macierzy  $\rho$  wyraża się wzorem:

$$\rho_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}\lambda} = v_{\mathbf{k}\lambda}^2 (1 - f_{\mathbf{k}\lambda} - f_{-\mathbf{k},-\lambda}) + f_{\mathbf{k}\lambda} \quad (4.12)$$

Kwadrat współczynnika  $v_{\mathbf{k}\lambda}$  traci tu zatem swoją interpretację związaną z prawdopodobieństwem obsadzenia stanu  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ . Rzeczywiście, nawet gdy jest on równy zero, prawdopodobieństwo to jest niezerowe i wynosi  $f_{\mathbf{k}\lambda}$ . Jest to formalny wyraz istnienia w układzie fluktuacji termicznych.

Analogicznie jak w przypadku temperatury zera bezwzględnej, aby z macierzy  $\rho$  odzyskać liczbę cząstek w układzie  $N$ , wystarczy dodać do siebie wszystkie jej elementy diagonalne (por. (3.18)):

$$N = \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}\lambda}^2 (1 - f_{\mathbf{k}\lambda} - f_{-\mathbf{k},-\lambda}) + f_{\mathbf{k}\lambda}] \quad (4.13)$$

Słuszne są również wzory (3.19) i (3.20) wyrażające średnie wartości operatorów jedno- i dwucząstkowych poprzez macierze gęstości. Należy wszakże pamiętać, że średnie te mają sens *średnich termodynamicznych*. Szczególnym przypadkiem drugiego z tych wzorów jest (4.8) pozwalający obliczyć energię wewnętrzną układu.

### 4.2.3 Potencjały $\Gamma$ i $\Delta$

Mając macierze gęstości (4.11), jesteśmy w stanie obliczyć elementy macierzowe jednocząstkowego potencjału średniopolowego  $\Gamma$  oraz potencjału korelacji par  $\Delta$  w niezerowej temperaturze. Jako że zgodnie z [14] wzory (3.27) i (3.29) są wciąż w mocy, obliczenia przebiegają analogicznie jak w podrozdziałach 3.3.4 oraz 3.3.5.

Po ich przeprowadzeniu, jednocząstkowy potencjał średniopolowy zapisze się wzorem:

$$\Gamma_{\mathbf{k}_1\lambda_1\mathbf{k}_2\lambda_2} = -\frac{g}{2L^3} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1\lambda_2} \sum_{\mathbf{k}<\mathbf{k}_c} [v_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k},-\lambda_1}^2 (1 - f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k},-\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k},\lambda_1}) + f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k},-\lambda_1}] \quad (4.14)$$

Z kolei potencjał korelacji par przyjmie postać:

$$\Delta_{\mathbf{k}_1\lambda_1 \mathbf{k}_2\lambda_2} = \frac{g}{2L^3} \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1, -\lambda_2} \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \sum_{k < k_c/2} s_{\mathbf{k}\lambda_1} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} (1 - f_{\mathbf{k}\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}, -\lambda_1}). \quad (4.15)$$

Porównując powyższe wzory z ich odpowiednikami dla temperatury zera bezwzględ- nego, można zauważyć, że istotne w dalszej części wyprowadzenia własności potencjałów  $\Gamma$  i  $\Delta$  nie ulegają w metodzie FTHFB zmianie. Macierz potencjału  $\Gamma$  wciąż jest diagonalna, a macierz potencjału  $\Delta$  – antysymetryczna. Na diagonalny element macierzowy potencjału  $\Gamma$  odpowiadający stanowi  $|\mathbf{k}_1\lambda_1\rangle$  wciąż składają się jedynie<sup>6</sup> przyczynki indeksowane wektorami pędu różniącymi się (wektorowo) od  $\mathbf{k}_1$  o wektor długości co najwyżej  $k_c$  oraz kierunkiem spinu  $-\lambda_1$ . Z kolei elementy macierzy  $\Delta$  zależą od  $\mathbf{k}_1$  jedynie poprzez funkcję  $\mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1)$ .

#### 4.2.4 Równania FTHFB

Pozostałe macierze występujące w równaniach FTHFB (4.9), tj. macierz operatora energii kinetycznej  $T_{\text{kin}}$  i macierz energii jednokwazicząstkowych  $E$  mają identyczną postać jak w metodzie HFB, tj. (3.31) i (3.32), odpowiednio.

Możemy zatem przejść do zapisania tych równań w bazie pędowo-spinowej. Przekształcenia, jakie musimy wykonać po drodze są całkowicie analogiczne do tych znanych z podrozdziałów 3.3.8 oraz 3.3.9. Nie będziemy ich tu zatem przytaczać.

Również konwencja fazowa, na jaką zdecydowaliśmy się podczas analizy równań HFB w podrozdziale 3.3.10 jest odpowiednia do naszych obecnych celów. Po jej uwzględnieniu (czego także tu nie przedstawiamy) układ równań FTHFB przyjmie postać niemal identyczną do (3.47)-(3.48):

$$(\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} + \mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \Delta(\lambda_1) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \quad (4.16)$$

$$\mathbb{I}_{[0, k_c/2]}(k_1) \Delta(\lambda_1) u_{\mathbf{k}_1\lambda_1} - (\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) - \mu) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} = E(\mathbf{k}_1\lambda_1) v_{\mathbf{k}_1\lambda_1} \quad (4.17)$$

gdzie  $\lambda_1$  przebiega zbiór  $\{\uparrow, \downarrow\}$ , natomiast  $\mathbf{k}_1$  – zbiór  $\{\frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ .

Różnica między równaniami FTHFB a równaniami HFB polega jedynie na definicji dwu funkcji pomocniczych  $\Xi$  (por. (3.36)) oraz  $\Delta$  (por. (3.49)):

$$\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) := \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c} [v_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}, -\lambda_1}^2 (1 - f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}, -\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}, \lambda_1}) + f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}, -\lambda_1}] \quad (4.18)$$

$$\Delta(\lambda_1) := \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}\lambda_1} v_{\mathbf{k}\lambda_1} (1 - f_{\mathbf{k}\lambda_1} - f_{-\mathbf{k}, -\lambda_1}) \right] \quad (4.19)$$

Obie powyższe funkcje pomocnicze zależą również od temperatury  $T$ , której jednak nie umieszczamy jawnie obok ich pozostałych argumentów, aby nie zaciemniać niepotrzebnie wzorów.

<sup>6</sup>Uprzedzamy tu nieco fakty, ponieważ każdy przyczynek zawiera również współczynnik  $f_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}, \lambda_1}$ , jednak jak za chwilę zobaczymy, prawdziwa jest równość:  $f_{\mathbf{k}\lambda} = f_{-\mathbf{k}, -\lambda}$ .

## 4.2.5 Konsekwencje symetrii odwrócenia spinu

W bieżącym wyprowadzeniu nie skorzystaliśmy jeszcze z założonej przez nas symetrii odwrócenia spinu, jaką posiada badany układ. Teraz więc, tak jak w podrozdziale 3.3.11, przyjmijmy, iż dla każdego  $\mathbf{k}$  zachodzą równości (3.50):

$$u_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}\downarrow} =: u_{\mathbf{k}} \quad \text{oraz} \quad v_{\mathbf{k}\uparrow} = v_{\mathbf{k}\downarrow} =: v_{\mathbf{k}}. \quad (4.20)$$

Dodatkowo, skoro chcemy zapewnić symetrię układu ze względu na zamianę kierunków spinu na przeciwne, musimy jeszcze zażądać, aby:  $f_{\mathbf{k}\uparrow} = f_{\mathbf{k}\downarrow} =: f_{\mathbf{k}}$ . Innymi słowy, prawdopodobieństwa obsadzeń stanów jednokwazicząstkowych odpowiadających stanom bazy jednocząstkowej o przeciwnych spinach muszą być sobie równe.

Tym razem już z tego dodatkowego wymogu postawionego w poprzednim akapicie oraz z definicji  $f_{\mu}$  (4.3) wynika, że również energie kwazicząstkowe można indeksować jedynie pędem:  $E(\mathbf{k}\uparrow) = E(\mathbf{k}\downarrow) =: E_{\mathbf{k}}$ .

Dzięki wszystkim wymienionym powyżej równościom, znacznemu uproszczeniu ulegną same równania FTHFB oraz obie funkcje pomocnicze wprowadzone w podrozdziale 4.2.4. Zacznijmy od tych drugich, a dokładniej od funkcji  $\Delta(\lambda_1)$  (4.19), która nie będzie już zależeć od  $\lambda_1$ :

$$\begin{aligned} \Delta(\lambda_1) = \Delta &= \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}} - f_{-\mathbf{k}}) \right] = \\ &= \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}}) - \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} f_{-\mathbf{k}} \right] = \\ &= \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - f_{\mathbf{k}}) - \sum_{k < k_c/2} u_{-\mathbf{k}} v_{-\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \right] = \\ &= \frac{g}{2L^3} \left[ \sum_{k < k_c/2} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

Przechodząc do drugiej linijki w powyższym ciągu równości, wyjęliśmy spod nawiasu  $f_{-\mathbf{k}}$  i rozdzieliśmy sumę na dwie. W trzeciej linijce w prawej sumie dokonaliśmy zamiany zmiennej sumowania z  $\mathbf{k}$  na  $-\mathbf{k}$ , zachowując to samo oznaczenie tej zmiennej. W czwartej linijce skorzystaliśmy z własności (3.10) współczynników  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  oraz ponownie złączyliśmy obie sumy.

Jakkolwiek podobnego triku nie można wykonać w przypadku drugiej funkcji pomocniczej  $\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1)$ , to również ona zależeć teraz będzie jedynie od pędu<sup>7</sup>  $\mathbf{k}_1$ :

$$\Xi(\mathbf{k}_1\lambda_1) = \Xi(\mathbf{k}_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c} \left[ v_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} - f_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} \right] \quad (4.22)$$

Zapisując równania FTHFB z uwzględnieniem symetrii odwrócenia spinu, okaże się, że będą one mieć identyczną strukturę jak równania HFB. Zapiszmy je zatem tak jak

<sup>7</sup>Oraz, jak już wspomnieliśmy pod koniec poprzedniego podrozdziału, temperatury  $T$ .

(3.53), czyli w przejrzystej, macierzowej postaci:

$$\begin{bmatrix} \Xi(\mathbf{k}_1) - \mu & \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta \\ \mathbb{I}_{[0, k_c/2)}(k_1) \Delta & -\Xi(\mathbf{k}_1) + \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

gdzie współczynnik Lagrange'a  $\mu$  zadany będzie przez warunek (por. (4.13)):

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}}^2 (1 - 2f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}}] \quad (4.24)$$

W powyższym wzorze uwzględniono już symetrię odwrócenia spinu oraz zastosowano identyczny trik jak przy (4.21).

Tak jak poprzednio, liczbę rzeczywistą  $\Delta$  będziemy nazywać *szczeliną energetyczną*.

## 4.2.6 Sprowadzenie równań FTHFB do układu dwóch równań

Dalsza część analizy równań FTHFB mająca na celu ich uproszczenie przebiega podobnie jak w podrozdziale 3.3.12 w przypadku równań HFB. Zaczynamy więc od rozważenia tej części równań, które odpowiadają pędom o wartościach  $k_1 \geq k_c/2$ . Ze względu na zerowanie się funkcji charakterystycznej w (4.23), nastąpi automatyczna diagonalizacja występującej w nich macierzy  $2 \times 2$ :

$$\begin{bmatrix} \Xi(\mathbf{k}_1) - \mu & 0 \\ 0 & -\Xi(\mathbf{k}_1) + \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

gdzie  $\mathbf{k}_1$  przebiega zbiór  $\{\frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\} \setminus B(0, k_c/2)$ .

Dalsze rozumowanie, przebiegające analogicznie do tego w 3.3.12, włącznie z narzuconym tam dodatkowym warunkiem na pęd obcięcia  $k_c$  (3.62) prowadzi do wniosku, iż (tak jak poprzednio) dla wszystkich  $k_1 \geq k_c/2$  zachodzi:

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{|g|n}{4} - \mu \leq E_{\mathbf{k}_1} \leq \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{|g|n}{4} - \mu, \quad (4.26)$$

a także:  $u_{\mathbf{k}_1} = 1$  i  $v_{\mathbf{k}_1} = 0$ .

Ten ostatni fakt wykorzystamy teraz w uproszczeniu wzoru (4.22) na funkcję pomocniczą  $\Xi(\mathbf{k}_1)$  dla  $k_1 < k_c/2$ .

$$\begin{aligned} \Xi(\mathbf{k}_1) &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \sum_{k < k_c} [v_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} - f_{-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}}] = \\ &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}} - f_{-\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}}] - \sum_{k \geq k_c} f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{g}{2L^3} \left( \frac{N}{2} - \sum_{k \geq k_c} f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (4.27)$$

gdzie przechodząc do drugiej linijki rozszerzyliśmy obszar sumowania na wszystkie wartości  $\mathbf{k}$  na identycznej zasadzie jak w uzasadnieniu wzoru (3.64), przy czym musieliśmy tu jeszcze odjąć wyraz  $\sum_{k \geq k_c} f_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}}$ , aby wszystko się zgadzało. W przejściu do trzeciej linijki skorzystaliśmy z (4.24).

Jak widać, funkcja pomocnicza  $\Xi$  nie przyjęła tym razem prostej, kwadratowej postaci (3.65). Jednakże, jak za chwilę pokażemy, dla rozrzedzonego gazu Fermiego prawdą jest, iż dla każdego  $\mathbf{k}_1$  takiego, że  $k_1 < k_c/2$ :

$$\frac{N}{2} \gg \sum_{k \geq k_c} f_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}} \quad (4.28)$$

Dzięki temu będzie można opuścić kłopotliwą sumę w ostatniej linijce (4.27).

Dowód powyższego stwierdzenia wymaga wszakże wzmocnienia warunku (3.62), stanowiącego, iż  $k_c$  jest „duże” (por. (2.12)). Założymy mianowicie (nawet nieco więcej, niż trzeba), że:

$$\frac{N}{2} \gg \sum_{k \geq k_c/2} f_{\mathbf{k}} = \sum_{k \geq k_c/2} \frac{1}{1 + \exp(\beta E_{\mathbf{k}})} \quad (4.29)$$

Z fizycznego punktu widzenia, w warunku tym żądamy, aby średnia łączna liczba kwazicząstek obsadzających stany jednokwazicząstkowe o energiach wyższych niż pewna, zależna od  $k_c$  wartość progowa, była znikoma w porównaniu do  $\frac{N}{2}$ . Innymi słowy, chcemy, by „ogon” rozkładu Fermiego-Diraca był zaniedbywalny w obliczeniach. Zwróćmy uwagę, że w postawionym przez nas warunku istotną rolę odgrywa również temperatura (ukryta w czynniku  $\beta$ ).

Do dyskusji warunku (4.29) wrócimy jeszcze w Rozdziale 5, przy okazji omawiania wyników obliczeń numerycznych.

Wynikanie zależności (4.28) z powyższego warunku najłatwiej dostrzec następująco. Zauważmy, że kula pędowa  $B(0, k_c/2)$  jest zawarta w kuli  $B(\mathbf{k}_1, k_c)$  dla każdego  $\mathbf{k}_1$  takiego, że  $k_1 < k_c/2$ . Gdy zastąpimy teraz obie kule pędowe ich dopełnieniami, kierunek inkluzji ulegnie odwróceniu:

$$B(\mathbf{k}_1, k_c) \supseteq B(0, k_c/2) \quad \Leftrightarrow \quad \{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k} \mid k \geq k_c\} \subseteq \{\mathbf{k} \mid k \geq k_c/2\} \quad (4.30)$$

A zatem, skoro w (4.29)  $N$  jest znacznie większe od sumy liczonej po zbiorze  $\{\mathbf{k} \mid k \geq k_c/2\}$ , tym bardziej jest ono większe od sumy liczonej po jego podzbiorze w (4.28)<sup>8</sup>.

Z powyższych rozważań wynika więc, że funkcję pomocniczą  $\Xi(\mathbf{k}_1)$  jednak można (dla  $k_1 < k_c/2$ ) zapisać w prostej postaci (3.65):

$$\Xi(\mathbf{k}_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma, \quad \text{gdzie: } \Gamma := -\frac{gn}{4}. \quad (4.31)$$

Oznacza to, że w przypadku rozrzedzonego gazu fermionów, niezerowa temperatura układu nie modyfikuje jednocząstkowego potencjału średniopolowego w żaden istotny sposób. Jak się jednak za chwilę przekonamy, zasadniczo wpływa na wartość szczyliny energetycznej.

Posługując się (4.31), możemy teraz w zwarty sposób zapisać, a następnie rozprząc równania FTHFB (4.23) odpowiadające pędom o długościach mniejszych niż  $k_c/2$ :

$$\begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu & \Delta \\ \Delta & -\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} = E_{\mathbf{k}_1} \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k}_1} \\ v_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

<sup>8</sup>Istotny jest tu fakt, że  $f_{\mathbf{k}}$  jest nieujemne dla każdego  $\mathbf{k}$ .

Równania te mają identyczną strukturę jak (4.32). Analogicznie jak w podrozdziale 3.3.12, wynikają z nich następujące równania na energie jednokwazicząstkowe  $E_{\mathbf{k}_1}$  oraz współczynniki  $u_{\mathbf{k}_1}$ ,  $v_{\mathbf{k}_1}$  (por. (3.68)-(3.69)):

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}_1} &= \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2} \\ u_{\mathbf{k}_1} &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu}{2E_{\mathbf{k}_1}}} \\ v_{\mathbf{k}_1} &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \Gamma - \mu}{2E_{\mathbf{k}_1}}} \end{aligned} \quad (4.33)$$

dla każdego  $\mathbf{k}_1$  takiego, że  $k_1 < k_c/2$ .

Z powyższych równań wynika, iż (por. (3.70)):

$$u_{\mathbf{k}_1} v_{\mathbf{k}_1} = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}_1}} \quad (4.34)$$

Podstawiając tą zależność do równania zadającego szczelinę energetyczną  $\Delta$  (4.21), otrzymujemy:

$$\Delta = \frac{g}{4L^3} \Delta \sum_{k < k_c/2} \frac{1 - 2f_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (4.35)$$

Tak jak poprzednio, skupiamy się jedynie na nietrywialnym rozwiązaniu  $\Delta \neq 0$ . Dzieląc powyższe równanie obustronnie przez  $\frac{g\Delta}{4L^3}$  oraz dodatkowo zauważając, że:  $(1 - 2f_{\mathbf{k}}) = \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{\mathbf{k}}\right)$ , otrzymujemy uogólnienie *równania szczeliny energetycznej* (3.72) na niezerowe temperatury:

$$\frac{4L^3}{g} = \sum_{k < k_c/2} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{\mathbf{k}}\right) \quad (4.36)$$

Analogicznie jak miało to miejsce w przypadku równań HFB, drugim równaniem, które współ z (4.36) pozwoli obliczyć  $\Delta$  i  $\mu$ , a z nich, na mocy wzorów (4.33), otrzymać rozwiązanie równań FTHFB, jest warunek wyrażający ustaloną liczbę cząstek w układzie (4.24). Zapiszmy go tutaj, uwzględnivszy zerowanie się współczynników  $v_{\mathbf{k}}$  przy  $k \geq k_c/2$ , dodatkowy warunek na  $k_c$  (4.29) oraz ostatni ze wzorów (4.33):

$$N = 2 \sum_{k < k_c/2} \left[ v_{\mathbf{k}}^2 (1 - 2f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \right] = \sum_{k < k_c/2} \left[ 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{\mathbf{k}}\right) \right] \quad (4.37)$$

Jest to uogólnienie *równania stałej liczby cząstek* (3.73) na niezerowe temperatury.

### 4.2.7 Przejście graniczne $L \rightarrow +\infty$ . Symetria obrotowa.

Kolejnym krokiem jest formalne przejście z  $L$  do nieskończoności, dzięki czemu równania (4.36), (4.37) staną się równaniami całkowymi, podobnie jak miało to miejsce w podrozdziale 3.3.13.

Dokonyjemy tego za pomocą przepisu (3.5), a rozumowanie przebiega podobnie jak we wzmiankowanym w poprzednim akapicie podrozdziale. Co więcej, zauważmy już w tym momencie, że także dla niezerowych temperatur mamy do czynienia z symetrią obrotową układu (por. podrozdział 3.3.14). Wynika to ze wzorów (4.33), które mają zresztą identyczną strukturę jak ich odpowiedniki z metody HFB.

Zapiśmy przeto jedynie wynik, w którym dokonano już zamiany całek trójwymiarowych na jednowymiarowe.

R-nie szczeliny energetycznej:

$$\frac{m}{\hbar^2} \left( k_c - \frac{\pi}{a} \right) = \int_0^{k_c/2} \frac{1}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) k^2 dk \quad (4.38)$$

R-nie stałej liczby cząstek:

$$2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{+\Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] k^2 dk \quad (4.39)$$

gdzie:

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2} \quad (4.40)$$

Tak jak poprzednio, przekształćmy równanie (4.38) do nieco innej postaci (por. (3.81)):

$$\frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] dk \quad (4.41)$$

Na koniec tego podrozdziału, dokonajmy jeszcze przejścia granicznego w warunku (4.29), określającego zakres stosowalności powyższych wyników. Zgodnie z przepisem (3.5), po kilku przekształceniach otrzymamy:

$$n \gg \frac{1}{\pi^2} \int_{k_c/2}^{+\infty} \frac{k^2}{1 + \exp(\beta E_k)} dk \quad (4.42)$$

## 4.3 Podsumowanie: rozwiązanie równań FTHFB oraz funkcjonal energii.

Podobnie jak uczyniono to w podrozdziale 3.4, tak i bieżący rozdział zakończymy podsumowaniem zawartych w nim rozważań<sup>9</sup>. Skupimy się tu wszakże jedynie na tych

<sup>9</sup>Oraz dokonując przejścia granicznego  $L \rightarrow +\infty$  tam, gdzie jeszcze tego nie zrobiliśmy.



wynikach, które odróżniają metodę FTHFB od jej szczególnego przypadku opisującego temperaturę zera bezwzględne.

Zacznijmy od parametrów wejściowych, gdzie do zestawu czterech wielkości:  $n$ ,  $m$ ,  $a$  oraz  $k_c$  doszła piąta - temperatura  $T$ . W podanych poniżej wzorach występować będzie niemal wyłącznie ukryta w czynniku  $\beta$ , zdefiniowanym wzorem (4.4):

$$\beta := \frac{1}{k_B T} \quad (4.43)$$

W naszej analizie przyjęliśmy, że rozrzedzony gaz fermionów w niezerowej temperaturze nie traci żadnej z symetrii narzuconych w podrozdziale 3.2. Dlatego też bazą kanoniczną rozwiązania samozgodnego przy  $T > 0$  nadal jest baza pędowo-spinowa  $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ . Rozwiązanie to okazało się posiadać również symetrię obrotową, toteż wielkości związane z poszczególnymi stanami bazy jednocząstkowej mające znaczenie fizyczne można indeksować nie za pomocą wektora pędu  $\mathbf{k}$ , a jedynie jego długości  $k$ .

Aby uniknąć komplikacji, byliśmy zmuszeni wzocnić warunek na pęd obięcia  $k_c$ . Mianowicie musi on być na tyle duży, aby spełniona była nierówność (4.42):

$$n \gg \frac{1}{\pi^2} \int_{k_c/2}^{+\infty} \frac{k^2}{1 + \exp(\beta E_k)} dk \quad (4.44)$$

Wzór ten wyraża założenie, że obsadzenie stanów jednocząstkowych odpowiadających pędowi przekraczającym co do długości wartość  $k_c/2$  jest zaniedbywalne.

Ponieważ, jak już wspomniano, baza pędowo-spinowa również przy  $T > 0$  jest bazą kanoniczną rozwiązania samozgodnego, macierze  $A$ ,  $B$  zapisane w tej bazie mają postać taką jak podano w podsumowaniu metody HFB, tj. (3.83). Ponadto, w metodzie FTHFB posłużyliśmy się tą samą konwencją fazową (3.84).

Wzory na współczynniki  $u_k$ ,  $v_k$  oraz na energie jednocząstkowe  $E_k$  (dla  $k < k_c/2$ ) charakteryzują się identyczną strukturą jak dla  $T = 0$  (por. (3.85) i (3.87)). W szczególności:

$$E_k = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \Gamma - \mu\right)^2 + \Delta^2} \quad \text{dla } k < k_c/2. \quad (4.45)$$

przy czym jednocząstkowy potencjał średniopolowy, którego wartość wyraża stała  $\Gamma$ , okazał się niewrażliwy na podniesienie temperatury. Toteż tak jak dla  $T = 0$  (por. (3.86)):

$$\Gamma := -\frac{gn}{4} = -\frac{2\pi^2 \hbar^2 n}{m(k_c - \pi/a)} \quad (4.46)$$

Analogicznie jak miało to miejsce w dyskusji wzoru (3.87), tu także energie jednocząstkowe indeksowane przez  $k \geq k_c/2$  mają bardziej skomplikowaną postać, jakkolwiek prawdziwe są oszacowania (4.26)

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{|g|n}{4} - \mu \leq E_{k_1} \leq \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{|g|n}{4} - \mu. \quad (4.47)$$

Główną nowością, jaką wnosi metoda FTHFB jest dodatkowy, „termiczny” czynnik  $\tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)$  pojawiający się w równaniu szczeliny energetycznej (3.89) oraz równaniu

stałej liczby cząstek (3.90). Uogólnienie tych równań na niezerowe temperatury ma postać:

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2mE_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] dk \quad (4.48)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{e^{\Gamma-\mu}}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] k^2 dk \quad (4.49)$$

Obecność tangensa hiperbolicznego, którego przebieg zależy od temperatury  $T$  układu sprawia, że niewiadome w powyższych równaniach: szczelina energetyczna  $\Delta$  oraz potencjał chemiczny  $\mu$  stają się funkcjami  $T$ . Jak się przekonamy w Rozdziale 5, istnieje taka temperatura  $T_z$ , w której wartość szczeliny energetycznej spada do zera.

Podobnie jak to uczyniliśmy w podrozdziale 3.4, tak i tu nadmienimy, że w powyższym układzie dwu równań szczególnie łatwo można dokonać formalnego przejścia granicznego  $k_c \rightarrow +\infty$ . Uzyskane równania różnią się od (3.91) jedynie obecnością czynnika „termicznego”:

$$\frac{\pi}{2a} \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \int_0^{+\infty} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2mE_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] dk, \quad (4.50)$$

$$2\pi^2 n \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \int_0^{+\infty} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{e^{-\mu}}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right] k^2 dk.$$

gdzie we wzorze na  $E_k$  (4.45) należy położyć  $\Gamma = 0$ .

Zbieżność powyższych całek wynika ze zbieżności ich odpowiedników przy  $T = 0$ . Zostaje to udowodnione w Dodatku.

Z pozostałych pojawiających się w równaniach FTHFB macierzy, jedynie macierze gęstości  $\rho$ ,  $\kappa$  są nieco innej postaci niż te podane w podrozdziale 3.4. Mianowicie:

- Hermitowska macierz gęstości:

$$\rho_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2} = \left[ v_{k_1}^2 \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{k_1}\right) + \frac{1}{1 + \exp(\beta E_{k_1})} \right] \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1 \lambda_2}, \quad (4.51)$$

- Antysymetryczny tensor korelacji par:

$$\kappa_{\mathbf{k}_1 \lambda_1 \mathbf{k}_2 \lambda_2} = -s_{\lambda_1} u_{k_1} v_{k_1} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_{k_1}\right) \delta^3(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta_{\lambda_1, -\lambda_2}, \quad (4.52)$$

Pozostałe macierze, a więc: jednocząstkowy potencjał średniopolowy  $\Gamma$ , potencjał korelacji par  $\Delta$ , macierz energii kinetycznej  $T_{\text{kin}}$  oraz macierz energii jednokwazicząstkowych  $E$  wyrażają się wzorami (3.94)-(3.97).

Ostatnia kwestia, jaka pozostała nam do rozważenia w tym rozdziale, to postać funkcjonału energii (wewnętrznej)  $E_{\text{FTHFB}}$ , danego ogólnym wzorem (4.8). Podstawimy

teraz do niego omówione przed chwilą macierze, aby uzyskać zwartą postać tego funkcjonału, stosowną dla rozrzedzonego gazu.

Obliczenia przeprowadzmy dla układu zamkniętego w sześciennym pudełku o boku  $L$ , tj. przy użyciu dyskretnej bazy pędowo-spinowej. W efekcie otrzymamy uogólnienie wzoru (3.98) na niezerowe temperatury:

$$E_{\text{FTHFB}} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k < k_c/2} \left[ k^2 \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right) \right] - \frac{2L^3}{g} (\Gamma^2 + \Delta^2) + \quad (4.53)$$

$$+ \frac{\hbar^2}{m} \sum_{k \geq k_c/2} \frac{k^2}{1 + \exp(\beta E_k)}$$

Oprócz znajomego tangensa hiperbolicznego, w powyższym wzorze obowiązującym przy  $T > 0$  pojawiła się suma po stanach bazy jednocząstkowej spoza kuli pędowej  $B(0, k_c/2)$ . Stanowi ona poprawkę do energii wewnętrznej ze względu na obsadzenia tych wysokoenergetycznych stanów.

Dzieląc powyższe równanie obustronnie przez  $L^3$  sprowadzimy je do postaci, w której możliwe będzie formalne przejście  $L \rightarrow +\infty$  zgodnie z przepisem (3.5). Po lewej stronie pojawi się średnia gęstość energii dla rozwiązania samozgodnego:

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} := E_{\text{FTHFB}}/L^3 \quad (4.54)$$

W wyniku przejścia granicznego i kilku dalszych przekształceń, otrzymujemy:

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \int_0^{k_c/2} \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right) k^4 dk - \frac{2}{g} (\Gamma^2 + \Delta^2) + \quad (4.55)$$

$$+ \frac{\hbar^2}{2\pi^2 m} \int_{k_c/2}^{+\infty} \frac{k^4}{1 + \exp(\beta E_k)}$$

Żądanie, aby poprawka do energii wewnętrznej (wyraz w drugiej linii powyższego wzoru) była zaniedbywalna ma postać warunku:

$$\frac{2\pi^2 m}{\hbar^2} \epsilon_{\text{HFB}} \gg \int_{k_c/2}^{+\infty} \frac{k^4}{1 + \exp(\beta E_k)} \quad (4.56)$$

Jest on podobny do (4.44) i razem z nim z grubsza określają minimalną wartość pędu obciążenia, przy której używane przez nas wzory można bezpiecznie stosować.

Spełnienie obu warunków: (4.44) oraz (4.56) sprawdzimy bezpośrednio w kolejnym Rozdziale 5, poświęconym wynikom obliczeń numerycznych.

Ostatecznie, zapiszmy wzór (4.55) w następującej postaci, najwygodniejszej dla obliczeń numerycznych:

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} = \frac{m\Delta^2}{4\pi^2 \hbar^2 a} + \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \int_0^{k_c/2} \left[ \left( 1 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right) k^4 - \frac{2m^2 \Delta^2}{\hbar^4} \right] dk - \quad (4.57)$$

$$- \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{m(k_c - \pi/a)}$$

gdzie wyraz:  $2\Gamma^2/g$  rozpisano zgodnie ze wzorami (3.82) oraz (4.46)

Również w wyrażeniu (4.57) można dokonać formalnego przejścia granicznego  $k_c \rightarrow +\infty$ . Uzyskane wyrażenie stanowi uogólnienie (3.101) na skończone temperatury:

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} \stackrel{k_c \rightarrow +\infty}{=} \frac{m\Delta^2}{4\pi^2\hbar^2 a} + \frac{\hbar^2}{4\pi^2 m} \int_0^{+\infty} \left[ \left( 1 - \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right) k^4 - \frac{2m^2\Delta^2}{\hbar^4} \right] dk \quad (4.58)$$

Wartość  $\Gamma$  w granicy nieskończonego  $k_c$  wynosi 0. Zbieżność pojawiającej się tu całki niewłaściwej udowodnimy w Dodatku (Rozdział 6).

## Rozdział 5

# Analiza numeryczna rozrzedzonego gazu Fermiego w przybliżeniu FTTHFB

Właściwości badanego przez nas jednorodnego rozrzedzonego gazu fermionów określone są w równaniach FTTHFB (4.48)-(4.49) przez cztery wielkości<sup>1</sup>: koncentrację cząstek  $n$ , temperaturę  $T$  oraz dwa parametry potencjału oddziaływania międzycząstkowego<sup>2</sup> – długość rozpraszania  $a$  oraz pęd obciążenia  $k_c$ .

Przez analizę tego układu rozumie się określenie, w jaki sposób jego właściwości zależą od tych czterech parametrów wejściowych.

Nieliniowy układ dwóch równań FTTHFB rozwiązywany był numerycznie w programie *Wolfram Mathematica 5.2* za pomocą specjalnie do tego celu napisanego bloku instrukcji. Również za pomocą tego programu obliczano gęstość energii wewnętrznej ze wzoru (4.57), sporządzano wykresy itp. Wyszczególnienie i opis najważniejszych użytych instrukcji można znaleźć w Dodatku (podrozdział 6.3).

Plan rozdziału jest następujący. Na początek przedstawione są uwagi natury technicznej dotyczące układu jednostek, formy prezentacji wyników obliczeń oraz postaci równań FTTHFB i wzoru na gęstość energii wewnętrznej, w jakich zostały one zaimplementowane numerycznie. Dalej następuje właściwa analiza, skupiająca się wprawdzie na dwóch z czterech parametrów wejściowych, kolejno: koncentracji  $n$  oraz pędzie obciążenia  $k_c$ . Dalej, pod kątem zależności od temperatury  $T$  gruntownie przebadany jest gaz w granicy unitarnej. Analiza zależności właściwości gazu od długości rozpraszania  $a$  (oraz pokrótce od  $T$  dla  $1/a \neq 0$ ) zamieszczona jest na końcu rozdziału.

---

<sup>1</sup>Masy  $m$  nie bierzemy tu pod uwagę.

<sup>2</sup>Por. Rozdział 2.

## 5.1 Uwagi techniczne

### 5.1.1 Układ jednostek i sposób prezentacji wyników

Wygodnym i powszechnie stosowanym<sup>3</sup> sposobem prezentacji wyników liczbowych dotyczących gazów Fermiego jest wyrażanie ich jako wielokrotności odpowiednich wielkości charakteryzujących układ fermionów nieoddziałujących (doskonały gaz Fermiego).

W tym kontekście wygodnie jest w obliczeniach przyjąć taki układ jednostek, w którym  $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$  oraz  $k_B = 1$ . Wówczas wielkości odnoszące się do doskonałego gazu Fermiego wyrażają się doskonale znanymi wzorami<sup>4</sup>:

- Pęd Fermiego

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (5.1)$$

- Energia i temperatura Fermiego (równe sobie na mocy  $k_B = 1$ ):

$$E_F = T_F = k_F^2, \quad (5.2)$$

- Gęstość energii doskonałego gazu Fermiego w stanie podstawowym:

$$\epsilon_{\text{DGF}} = \frac{3}{5} n E_F. \quad (5.3)$$

Z powyższych wzorów wynika, że przyjęta przez nas koncentracja cząstek  $n$  determinować będzie zestaw czterech wielkości, za pomocą których wyrażane będą wszystkie pozostałe parametry i wielkości charakteryzujące badany przez nas rozrzedzony gaz fermionów oddziałujących.

Jak się za chwilę okaże, jest to słuszny sposób opisu takiego gazu, albowiem wyrażone w ten sposób wyniki będą niezależne<sup>5</sup> od wartości  $n$ .

Założona dokładność uzyskiwanych w programie wyników to cztery bądź pięć cyfr znaczących (w zależności od wielkości fizycznej). Ze względu wszakże na zależność wyników od  $k_c$  uczciwie jest prezentowanie ostatecznych wyników z dokładnością do trzech cyfr znaczących (por. również podrozdział 5.3).

### 5.1.2 Równania FTHFB w różnych przypadkach

Pożyteczne będzie ponowne przywołanie w tym miejscu równań FTHFB. Przemawia za tym kilka względów.

Po pierwsze, dzięki przyjętym w poprzednim podrozdziale układowi jednostek zyskają one nieco na przejrzystości.

---

<sup>3</sup>Por. np. [12, 15, 20].

<sup>4</sup>Por. np. [22, 29].

<sup>5</sup>Przynajmniej w ramach (przybliżonej) metody FTHFB oraz w rozważanym zakresie koncentracji  $n$ .

Po drugie, choć z formalnego punktu widzenia równania (4.48)-(4.49) są słuszne dla  $\Delta \neq 0$ , to ich numeryczna implementacja wymaga osobnego rozważenia przypadku  $T = 0$  i  $T > 0$ .

Po trzecie, z doświadczenia wiadomo, że fermionowe gazy atomowe nie wykazują korelacji w wysokich temperaturach, co oznacza, że musi istnieć taka temperatura  $T_z$ , w której wartość szczeliny energetycznej<sup>6</sup>  $\Delta$  spada ostatecznie do zera. Wynika stąd, że będziemy musieli również rozwiązać równania, do których sprowadzą się równania FTHFB przy  $\Delta \rightarrow 0$  (z których otrzymamy  $T_z$ ), a w końcu przy  $\Delta = 0$  i  $T > T_z$ .

Charakterystyczną temperaturę  $T_z$  będziemy nazywać po prostu *temperaturą zaniku korelacji*<sup>7</sup>.

### Przypadek $T = 0$

Równania FTHFB sprowadzają się tu po prostu do równań HFB (3.89)-(3.90):

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left(1 - \frac{k^2}{E_{0,k}}\right) dk \quad (5.4)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left(1 - \frac{k^2 + \Gamma - \mu_0}{E_{0,k}}\right) k^2 dk \quad (5.5)$$

gdzie:  $E_{0,k} := \sqrt{(k^2 + \Gamma - \mu_0)^2 + \Delta_0^2}$ .

Należy zwrócić uwagę, że również  $\Delta$  i  $\mu$  zostały opatrzone indeksem „0”. Szczelina energetyczna i potencjał chemiczny są funkcjami temperatury, a indeks ten to skrótowy zapis wartości tych funkcji w punkcie  $T = 0$ :

$$\Delta_0 := \Delta(0) \quad \text{oraz} \quad \mu_0 := \mu(0) \quad (5.6)$$

### Przypadek $0 < T < T_z$

Jedyną różnicą względem (4.48)-(4.49) to przyjęcie  $\frac{\hbar^2}{2m} = k_B = 1$ :

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left[1 - \frac{k^2}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right)\right] dk \quad (5.7)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left[1 - \frac{k^2 + \Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right)\right] k^2 dk \quad (5.8)$$

gdzie:  $E_k := \sqrt{(k^2 + \Gamma - \mu)^2 + \Delta^2}$ .

<sup>6</sup>Jak wspomniano w podrozdziale 3.3.5, potencjał korelacji par, a zatem i szczelina energetyczna stanowią miarę korelacji obecnych w układzie między stanami bazy jednocząstkowej.

<sup>7</sup>Randeria [15] używa oznaczenia  $T_0$  i określa *crossover scale*, a także *pairing scale*.

### Przypadek $T = T_z$

Temperatura zaniku korelacji  $T_z$  zdefiniowana jest jako taka, w której następuje  $\Delta \rightarrow 0$ . Dlatego jej wartość możemy otrzymać z równań (5.7)-(5.8), w których dokonano właśnie takiego przejścia granicznego. Mamy zatem:

$$\text{R-nie szczeliny energetycznej:} \quad \frac{\pi}{2a} = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \frac{k^2}{k^2 + \Gamma - \mu_z} \tanh \left( \frac{k^2 + \Gamma - \mu_z}{2T_z} \right) \right] dk \quad (5.9)$$

$$\text{R-nie stałej liczby cząstek:} \quad 2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \tanh \left( \frac{k^2 + \Gamma - \mu_z}{2T_z} \right) \right] k^2 dk \quad (5.10)$$

Drugą obok  $T_z$  niewiadomą w powyższym układzie równań jest  $\mu_z := \mu(T_z)$ .

### Przypadek $T > T_z$

W tym przypadku  $\Delta = 0$ , toteż mamy do czynienia z układem w stanie normalnym, niewykazującym żadnych korelacji. Równanie (5.7) nie obowiązuje, albowiem ogólniejsze od niego równanie (3.71) jest teraz spełnione w sposób trywialny.

Ponieważ jednak mamy obecnie tylko jedną niewiadomą (potencjał chemiczny  $\mu$ ), równanie stałej liczby cząstek (5.8) jest wystarczające:

$$2\pi^2 n = \int_0^{k_c/2} \left[ 1 - \tanh \left( \frac{k^2 + \Gamma - \mu}{2T} \right) \right] k^2 dk \quad (5.11)$$

Można powiedzieć, że gdy  $\Delta = 0$ , metoda FTHFB sprowadza się do prostszej metody Hartree-Focka dla niezerowych temperatur. Opisuje ona system jako doskonały gaz Fermiego<sup>8</sup>.

### 5.1.3 Przybliżona postać wzoru (4.57) na $\epsilon_{\text{FTHFB}}$

Uwzględniając układ jednostek wprowadzony w podrozdziale 5.1.1 oraz motywacje przedstawione na początku poprzedniego podrozdziału, zapiszmy wzór (4.57) na gęstość energii wewnętrznej dla poszczególnych przedziałów temperatur:

Dla  $T = 0$ :

$$\epsilon_{\text{FTHFB0}} = \frac{\Delta_0^2}{8\pi^2 a} + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_c/2} \left[ \left( 1 - \frac{k^2 + \Gamma - \mu_0}{E_{0,k}} \right) k^4 - \frac{\Delta_0^2}{2} \right] dk - \frac{2\pi^2 n^2}{k_c - \pi/a} \quad (5.12)$$

---

<sup>8</sup>Por. Rozdział 8. w [13], a także uwaga pod koniec podrozdziału 3.1 w [15].



Dla  $0 < T < T_z$ :

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} = \frac{\Delta^2}{8\pi^2 a} + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_c/2} \left[ \left( 1 - \frac{k^2 + \Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right) \right) k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \right] dk - \frac{2\pi^2 n^2}{k_c - \pi/a} \quad (5.13)$$

Dla  $T \geq T_z$ :

$$\epsilon_{\text{FTHFB}} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_c/2} \left( 1 - \tanh\left(\frac{k^2 + \Gamma - \mu}{2T}\right) \right) k^4 dk - \frac{2\pi^2 n^2}{k_c - \pi/a} \quad (5.14)$$

Zapiszmy teraz za pomocą pojedynczego, formalnego wzoru funkcję pojawiającą się pod całką we wzorach (5.12)-(5.14):

$$w(k) := \left[ 1 - \frac{k^2 + \Gamma - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right) \right] k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \quad (5.15)$$

Podczas formułowania instrukcji w środowisku *Mathematica*, w toku wstępnych obliczeń numerycznych okazało się, że szczególna postać tej funkcji prowadzi do pojawienia się silnego szumu numerycznego dla dużych  $k$  (por. Rys. 5.1). Bierze się on stąd, iż dla  $k$  znacznie większych od  $\Delta^{1/2}$  zawartość nawiasu kwadratowego w (5.15) jest bliska zeru, a program musi przemnożyć ją jeszcze przez  $k^4$ . Bez względu na kolejność wykonywania działań następuje tu utrata dokładności obliczeń.

Szum numeryczny uniemożliwił zaimplementowanym w programie algorytmom całkowania wykonanie obliczeń z żadaną dokładnością, prowadząc do znacznego wypaczenia wyników. Problem ten pojawiał się, ilekroć przyjmowano  $k_c$  rzędu kilkudziesięciu-kilkuset<sup>9</sup>  $k_F$  i więcej.

Aby temu zaradzić, postanowiono dla  $k > 30k_F$  zastępować funkcję  $w(k)$  jej postacią asymptotyczną. Rozwijając ją w szereg Maclaurina ze względu na argument  $1/k$ , można otrzymać, iż:

$$w(k) \stackrel{k \rightarrow +\infty}{\approx} \frac{\Delta^2(\mu - \Gamma)}{k^2} + \frac{3\Delta^2[4(\mu - \Gamma)^2 - \Delta^2]}{k^4} + \frac{\Delta^2(\mu - \Gamma)[4(\mu - \Gamma)^2 - 3\Delta^2]}{2k^6} \quad (5.16)$$

Powyższy szereg<sup>10</sup> ucięto po wyrazie zawierającym  $k^{-6}$ . Nie jest to decyzja zupełnie arbitralna. Jak bowiem wspomniano, problem szumu numerycznego pojawiał się dopiero od pewnej wartości pędu obciążenia. Wyniki całkowania przy małym  $k_c$ , mimo ich niefizyczności<sup>11</sup>, można było zatem wykorzystać w celu sprawdzenia słuszności powyższej „metody asymptotycznej”.

Okazało się, że obcinając szereg (5.16) już po wyrazie zawierającym  $k^{-4}$  uzyskiwano zgodność w otrzymywanych wartościach  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  przekraczającą pięć cyfr znaczących,

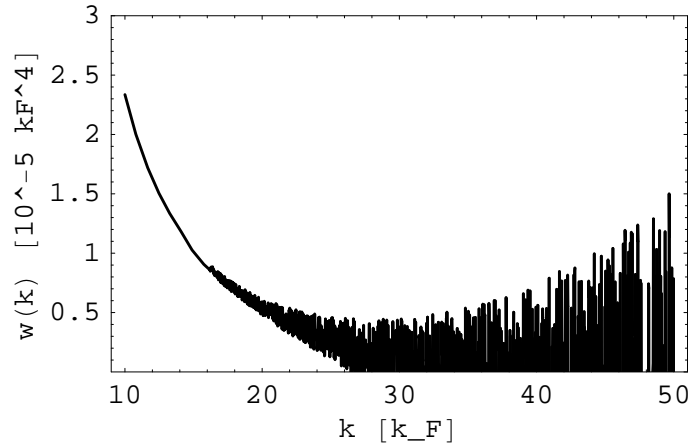
<sup>9</sup>Zależnie od parametrów wejściowych.

<sup>10</sup>Reszta tego szeregu (w postaci Peano) jest  $o(k^{-8})$ .

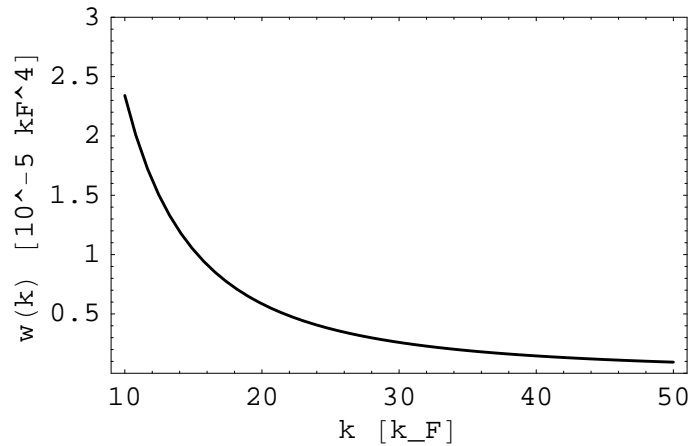
<sup>11</sup>Por. warunek (2.12).

a więc satysfakcjonującą (por. podrozdział 5.1.1). Dla większej pewności uwzględniono jeszcze jeden wyraz szeregu.

W celu zilustrowania powyższej argumentacji zestawiono poniżej fragmenty wykresów funkcji  $w(k)$  przed (Rys. 5.1) i po (Rys. 5.2) skorzystaniu z jej postaci asymptotycznej (5.16). Parametry wejściowe:  $n = 100\text{m}^{-3}$ ,  $1/a = 0$ ,  $k_c = 370 k_F$ .



Rysunek 5.1: Fragment wykresu funkcji  $w(k)$  obliczonej numerycznie dla ww. parametrów wejściowych. Już dla  $k$  rzędu kilkunastu  $k_F$  zauważalny staje się szum numeryczny, który w miarę narastania uniemożliwia numeryczne całkowanie tej funkcji.



Rysunek 5.2: Fragment wykresu funkcji (5.16), stanowiącej asymptotyczną postać funkcji  $w(k)$ . Parametry wejściowe oraz zakresy obu osi są identyczne jak poprzednio. Można zauważyć, że przebieg krzywej wykresu odpowiada temu z lewej części Rys. 5.1, wolnej od szumu numerycznego. Samo zjawisko szumu na powyższym wykresie nie pojawia się.

## 5.2 Stabilność wyników ze względu na koncentrację cząstek $n$

Przechodzimy teraz do właściwej analizy wyników metody FTHFB. Rozpocznijmy od, jak się okazuje najprostszej, zależności od  $n$ .

Rozważmy pięć wartości koncentracji:  $n = 10^i \text{ m}^{-3}$ , gdzie  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ .

Dla takich  $n$  rozwiązano równania FTHFB w dwu temperaturach:  $T = 0$  (por. (5.4)-(5.5)) oraz  $T = T_z$  (por. (5.9)-(5.10)), przy czterech wartościach pędu obciążenia:  $k_c = 1000 k_F, 2000 k_F, 3000 k_F, 4000 k_F$  oraz przy dwu wartościach długości rozpraszania<sup>12</sup>:  $1/a = 0$  i  $1/a = k_F$ .

Numeryczne rozwiązanie powyższych 80 układów równań FTHFB przyniosło następujący rezultat. Wszystkie rozważane w niniejszej pracy wielkości charakteryzujące gaz Fermiego, a więc: potencjał chemiczny i szczelina energetyczna, gęstość energii wewnętrznej oraz temperatura zaniku korelacji, gdy wyrazi się je za pomocą odpowiednio:  $E_F, \epsilon_{\text{DGF}}$  oraz  $T_F$  nie zależą od koncentracji cząstek  $n$ .

Przykładowo, dla  $k_c = 2000 k_F$  oraz  $1/a = 0$  dla wszystkich rozważanych wartości  $n$  uzyskano wyniki:

| $\Delta_0 [E_F]$ | $\mu_0 [E_F]$ | $\epsilon_{\text{FTHFB0}} [\epsilon_{\text{DGF}}]$ | $T_z [T_F]$ | $\mu_z [E_F]$ | $\epsilon_{\text{FTHFBz}} [\epsilon_{\text{DGF}}]$ |
|------------------|---------------|--|-------------|---------------|--|
| 0,68(6)          | 0,59(0)       | 0,59(0)  | 0,49(6)     | 0,74(7)       | 1,5(9)   |

Tablica 5.1: Przykładowy zestaw wyników uzyskany podczas badania ich zależności od  $n$ , słuszny dla wszystkich rozważanych wartości koncentracji.

To, że właściwości rozrzedzonego gazu Fermiego nie zależą od jego gęstości jest całkowicie zrozumiałe w granicy unitarnej ze względu na „uniwersalność” przejawianą przez badany układ<sup>13</sup>. Jak widać, rozważany gaz posiada tę cechę również ogólnie w reżimie unitarnym – przynajmniej dla przeanalizowanego w tej pracy zakresu  $n$ .

W świetle powyższego, jest rzeczą zrozumiałą, że w dalszej części analizy możemy bez straty ogólności trzymać się jednej wartości  $n$ . Od tej pory przyjmujemy więc:  $n = 100 \text{ m}^{-3}$ . Umotywowane jest to tym, iż większe wartości koncentracji prowadziły niekiedy do (sygnalizowanej przez środowisko *Mathematica*) powolnej zbieżności obliczanych numerycznie całek.

## 5.3 Stabilność wyników ze względu na pęd obciążenia $k_c$

Dokonyamy teraz analizy zależności rozwiązań równań FTHFB od wartości pędu obciążenia  $k_c$ , podobnej do tej przeprowadzonej w poprzednim podrozdziale.

W tym celu rozważmy następujące wartości pędu obciążenia<sup>14</sup>:  $k_c = 10^i k_F$ , gdzie:  $i = 6, 7, \dots, 320$ .

<sup>12</sup>Ponieważ zajmujemy się gazem w reżimie unitarnym, wygodniej niż długością rozpraszania jest posługiwać się jej odwrotnością  $1/a$ .

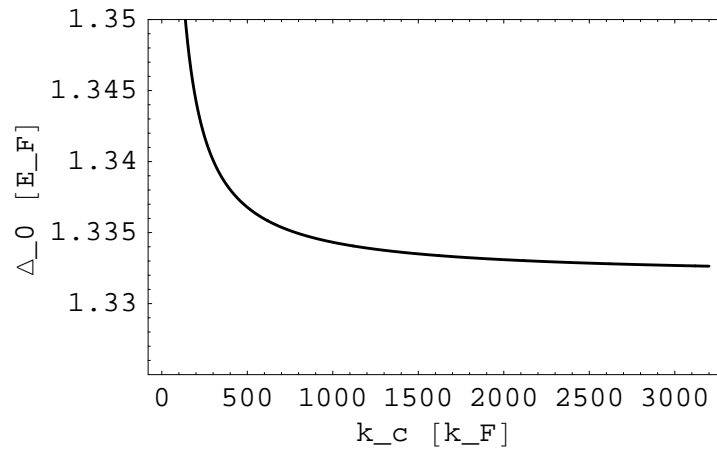
<sup>13</sup>Por. podrozdział 1.3, a także [12, 21].

<sup>14</sup>To, że najniższa rozważona wartość  $k_c/k_F$  wynosi 60 ma związek z zastosowaniem „metody asymptotycznej” przy obliczaniu  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  (por. 5.1.3). Chodziło o to, aby uniknąć modyfikowania kodu.

Dla takich  $k_c$  rozwiązano równania FTHFB w dwu temperaturach:  $T = 0$  oraz  $T = T_z$  i przy dwu wartościach długości rozpraszania<sup>15</sup>:  $1/a = 0$  oraz  $1/a = k_F$ .

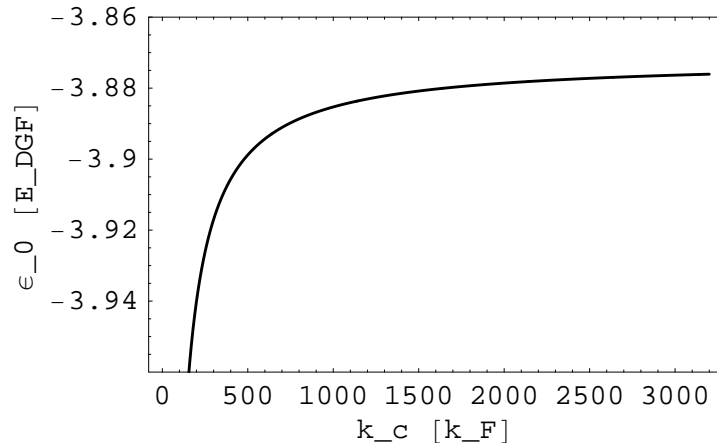
Numeryczne rozwiązanie opisanych powyżej 1260 układów równań FTHFB przyniosło następujące rezultaty. Dla obu rozważonych wartości  $1/a$  wielkości charakteryzujące badany układ, a więc: potencjał chemiczny i szczelina energetyczna, gęstość energii wewnętrznej oraz temperatura zaniku korelacji ze wzrostem pędu obciążenia  $k_c$  zbiegają *monotonicznie do pewnych skończonych, właściwych sobie granic*. Mówiąc nieco bardziej obrazowo, w granicy bardzo dużych wartości pędu obciążenia rozwiązania równań FTHFB przestają od niego zależeć.

Przykładowo, dla  $1/a = k_F$  otrzymano następującą, malejącą zależność  $\Delta_0(k_c)$ :



Rysunek 5.3:  $\Delta_0$  w funkcji pędu obciążenia. W granicy dużych  $k_c$  wartość szczeliny energetycznej w temperaturze  $T = 0$  stabilizuje się na poziomie ok.  $1,333 E_F$ .

Z kolei gęstość energii wewnętrznej  $\epsilon_{\text{FTHFB0}}$  zależy tu od  $k_c$  w sposób rosnący:



Rysunek 5.4:  $\epsilon_{\text{FTHFB0}}$  w funkcji pędu obciążenia. W granicy dużych  $k_c$  wartość gęstości energii w temperaturze  $T = 0$  stabilizuje się na poziomie ok.  $-3,875 \epsilon_{\text{DGF}}$ .

<sup>15</sup>Zgodnie z ustaleniami poprzedniego podrozdziału, przyjęto:  $n = 100 \text{ m}^{-3}$ .

Przedstawianie tu pozostałych zbadanych zależności mija się z celem. Ich charakter oddają w pełni dwa reprezentatywne wykresy przedstawione powyżej.

Powyższy rezultat staje się zrozumiałą, jeśli przywołamy sens fizyczny  $k_c$  oraz jego rolę w przedstawionych w Rozdziałach 2, 3, 4 wyprowadzeniach. Przypomnijmy, że wprowadzenie pędu obciążenia było wymuszone koniecznością renormalizacji potencjału kontaktowego (2.8), na którym zbudowaliśmy naszą teorię efektywną.

Jest rzeczą intuicyjnie zrozumiałą, że prawidłowo przeprowadzona renormalizacja pozwala otrzymać skończone wyniki, gdy w końcowych wzorach przejdziemy z wprowadzonym w jej ramach parametrem do stosownej granicy (tu:  $k_c \rightarrow +\infty$ ). Właśnie tak rzecz się miała, gdy dokonaliśmy przejścia granicznego w równaniach HFB (3.91) oraz FTHFB (4.50). Nie dziwi przeto stabilizowanie się wartości wielkości termodynamicznych charakteryzujących badany układ wraz ze wzrostem  $k_c$ .

Ponieważ, jak pokazaliśmy, rozwiązania równań FTHFB słabo zależą od pędu obciążenia dla dużych jego wartości, możemy zdecydować się odtąd na jedną, odpowiednio dużą wartość  $k_c$  i twierdzić, że uzyskane wyniki stosują się również do wyższych jego wartości (z pewną satysfakcjonującą dokładnością).

Będziemy więc odtąd przyjmować:  $k_c = 3000 k_F$ . Wybór ten podyktowany jest następującymi argumentami.

Po pierwsze, wszystkie uzyskane w opisanej powyżej analizie wykresy (w tym te na Rys. 5.3 i 5.4) są już przy  $3000 k_F$  na tyle płaskie, że odczytywana z nich w tym punkcie wartość zmiennej zależnej jest równa wartości granicznej z dokładnością przynajmniej do trzeciej cyfry znaczącej. Jest to zupełnie satysfakcjonujące, zwłaszcza że w tej pracy nie wychodzimy poza – ze swej natury przybliżoną – metodę FTHFB. Co więcej, w literaturze (por. [12]) wartości  $\Delta_0$ ,  $T_z$  i innych wielkości charakteryzujących rozrzedzony gaz Fermiego podawane są właśnie z dokładnością do dwóch-trzech cyfr znaczących.

Po drugie, wzięcie wyższych wartości  $k_c$  utrudnia obliczenia numeryczne. Pokonywanie tych trudności wiąże się natomiast z wydłużaniem czasu obliczeń.

Po trzecie, przy  $k_c = 3000 k_F$  spełnione są już warunki (4.44) oraz (4.56)<sup>16</sup>.

## 5.4 Termodynamika gazu Fermiego w granicy unitarnej

W niniejszym podrozdziale zbadamy, jakie własności termodynamiczne posiada rozrzedzony gaz Fermiego w granicy unitarnej w przybliżeniu FTHFB. W pierwszej kolejności opiszemy stan podstawowy układu oraz przeanalizujemy zależności: szczeliny energetycznej  $\Delta$ , potencjału chemicznego  $\mu$  i gęstości energii wewnętrznej  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  w funkcji temperatury. Następnie wykażemy, że badany układ odznacza się stabilnością równowagi termodynamicznej.

<sup>16</sup>Próba numerycznego obliczenia pojawiających się w nich całek dla rozważonych w tym podrozdziale wartości  $1/a$  oraz  $T$  prowadzi każdorazowo do zerowego wyniku – leży on poniżej maksymalnej dokładności środowiska *Mathematica*.

### 5.4.1 Właściwości układu w stanie podstawowym oraz w niezerowych temperaturach.

Bieżący podrozdział traktuje o granicy unitarnej, w związku z czym kładziemy:  $1/a = 0$ . Zgodnie z dotychczasowymi ustaleniami przyjmujemy również:  $n = 100 \text{ m}^{-3}$  oraz  $k_c = 3000 k_F$ .

W pierwszej kolejności obliczono wartości funkcji  $\Delta(T)$ ,  $\mu(T)$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$  w temperaturze  $T = 0$  (rozwiązując (5.4)-(5.5), a następnie obliczając (5.12)) oraz w temperaturze  $T = T_z$  (jej wartość otrzymano rozwiązując (5.9)-(5.10), a następnie obliczono przy niej (5.14)). Uzyskane wyniki zawarto w tabeli:

| $\Delta_0 [E_F]$ | $\mu_0 [E_F]$ | $\epsilon_{\text{FTHFB0}} [\epsilon_{\text{DGF}}]$ | $T_z [T_F]$ | $\mu_z [E_F]$ | $\epsilon_{\text{FTHFBz}} [\epsilon_{\text{DGF}}]$ |
|------------------|---------------|--|-------------|---------------|--|
| 0,68(6)          | 0,59(0)       | 0,59(0)  | 0,49(6)     | 0,74(7)       | 1,6(0)   |

Tablica 5.2: Podstawowe wielkości charakteryzujące gaz Fermiego w granicy unitarnej w przybliżeniu FTHFB.

Nim przejdziemy dalej, poczyńmy kilka uwag.

Zacznijmy od uwagi natury technicznej. Warto zauważyć, że wartości zawarte w powyższej tabeli pokrywają się niemal dokładnie<sup>17</sup> z tymi w Tabeli 5.1. której zawartość była wynikiem przyjęcia w obliczeniach:  $k_c = 2000 k_F$ . Jest to więc dobra ilustracja faktu, że dla przyjętej w naszych analizach wartości pędu obciążenia otrzymywane wyniki praktycznie już od niego nie zależą.

Przejdźmy teraz do uwag i wyników natury fizycznej.

Pierwszy ważny wniosek jest taki, iż metoda FTHFB słusznie przewiduje, że pojawienie się korelacji w układzie ( $\Delta \neq 0$ ) w niskich temperaturach prowadzi do obniżenia jego energii. Cząstkom „opłaca się” tworzyć pary kanonicznie sprzężone<sup>18</sup>.

Jak mogliśmy się spodziewać, nasze przybliżenie określa temperaturę  $T_z$ , w której zanikają korelacje, a układ przechodzi w fazę normalną. Jak wiadomo z dokładniejszych modeli (por. np. [12, 15, 30]), *nie* jest to temperatura przejścia układu z fazy normalnej do nadciekłej (oznaczana zazwyczaj przez  $T_c$ ). Ta pierwsza sygnalizuje bowiem jedynie tworzenie się par kanonicznie sprzężonych, podczas gdy ta druga – ich kondensację. Przybliżenie FTHFB niestety nie pozwala na określenie  $T_c$ . Można jedynie stwierdzić, iż  $T_c \leq T_z$ .

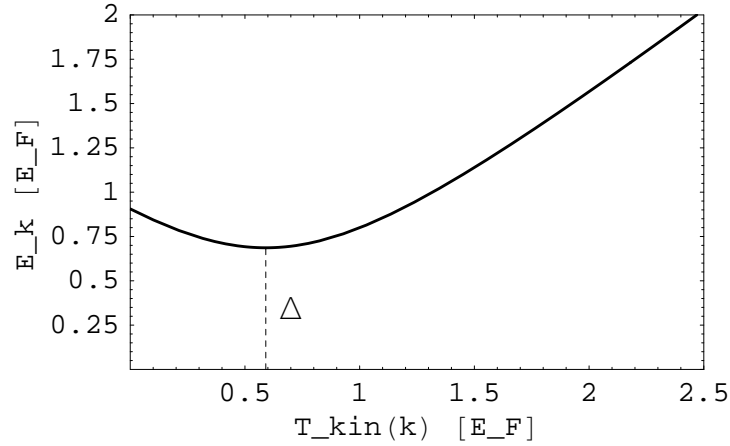
Kolejnym wynikiem jest równość bezwymiarowych stosunków:  $\mu_0/E_F = \epsilon_{\text{FTHFB0}}/\epsilon_{\text{DGF}} = 0,59(0)$ . Zbieżność ta nie jest przypadkowa, ale stanowi jedną z konsekwencji „uniwersalności” układu w granicy unitarnej<sup>19</sup>.

<sup>17</sup>Jedynie wartość  $\epsilon_{\text{FTHFBz}}$  różni się co do ostatniej cyfry znaczącej.

<sup>18</sup>Por. podrozdział 3.1.3.

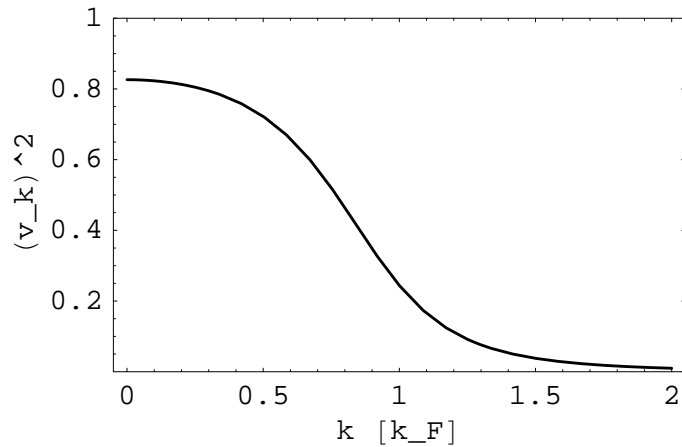
<sup>19</sup>Konkretniej, można ją otrzymać z równania stanu (1.2), por. [12], podrozdział IV F.

Na poniższym wykresie przedstawiono otrzymane widmo energii jednokwazi-  
cząstkowych  $E_k$  w stanie podstawowym<sup>20</sup>:



Rysunek 5.5: Widmo energii jednokwazi-cząstkowych. Dla przejrzystości wykreślono je w funkcji  $T_{\text{kin}}(k) := k^2$ , tj. energii kinetycznej. Linia przerywana, przerzucona przez „szczelinę” oddzielającą oś odciętych od krzywej wykresu ma długość  $\Delta$ . Stąd właśnie bierze się nazwa tej ostatniej wielkości – *szczelina energetyczna*.

Poniżej przedstawiono również rozkład prawdopodobieństwa obsadzeń stanów jednocząstkowej bazy pędowej. Jak pokazano w podrozdziale 3.3.3, prawdopodobieństwo obsadzenia stanu indeksowanego pędem o długości  $k$  jest równe  $v_k^2$  (o ile  $T = 0$ ), a to ostatnie dane jest wynikającym z równań FTHFB wzorem (4.33).



Rysunek 5.6: Rozkład prawdopodobieństwa obsadzeń stanów jednocząstkowej bazy pędowej w stanie podstawowym układu. Jak widać, istnienie korelacji prowadzi do obsadzenia stanów powyżej poziomu Fermiego.

<sup>20</sup>Jest to nic innego jak odpowiednio wyskalowany wykres funkcji  $\sqrt{(k^2 + \Gamma - \mu_0)^2 + \Delta_0^2}$ , por. np. podrozdział 5.1.2, przypadek  $T = 0$ .

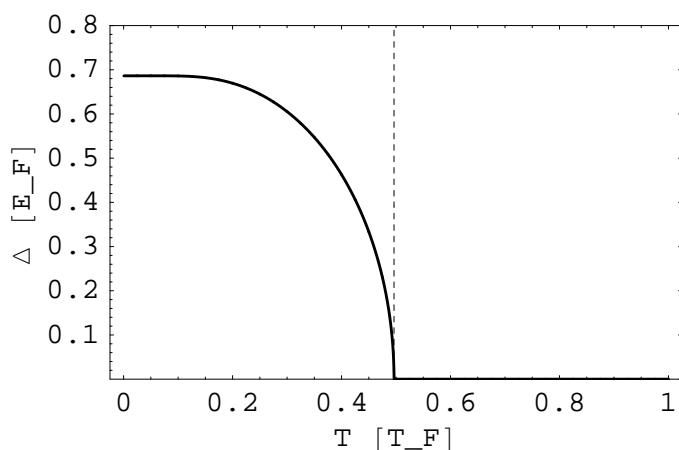
W temperaturze zaniku korelacji powyższy wykres ma postać bliską schodkowej, charakteryzującej układ fermionów nieoddziałujących. Niewielkie rozmycie bierze się wówczas jedynie z fluktuacji termicznych.

Porównajmy zestawione w Tabeli 5.2 wyniki z literaturą. Jak można przeczytać w podrozdziale V A przeglądowej pracy [12], otrzymana w *przybliżeniu średniopowym*<sup>21</sup> wartość szczeliny energetycznej w stanie podstawowym wynosi:  $\Delta_0 = 0,69 E_F$ , natomiast gęstość energii wewnętrznej:  $\epsilon_{\text{FTHFB0}} = 0,59 E_{\text{DGF}}$ . Z kolei z wykresu Fig.2. w [15] można odczytać  $T_z \approx 0,5 T_F$ . Ta zgodność świadczy o prawidłowym wyprowadzeniu i rozwiązaniu równań FTHFB dla badanego układu.

Przejdziemy obecnie do opisu przebiegu funkcji  $\Delta(T)$ ,  $\mu(T)$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$ .

Przedstawione poniżej wykresy otrzymano, rozwiązując równania FTHFB oraz obliczając  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  w temperaturach:  $T = \frac{i}{2000} T_F$ , gdzie:  $i = 1, 2, \dots 2000$ .

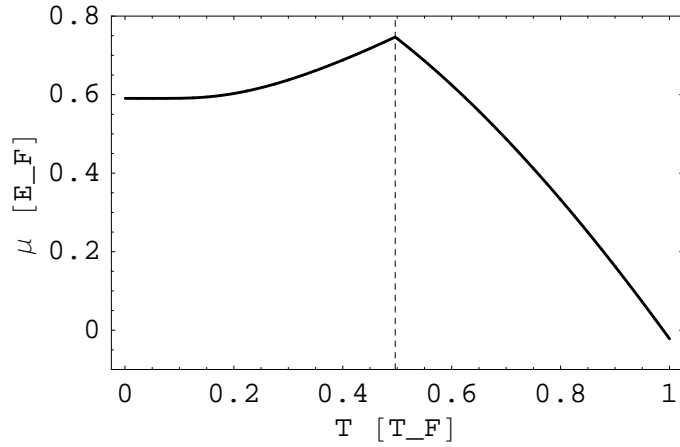
Dzięki znajomości  $T_z$  można było każdorazowo określić, czy należy rozwiązać równania (5.7)-(5.8), czy też równanie (5.11). Na wszystkie trzy wykresy naniesiono przerywaną linię o równaniu  $T = T_z$ .



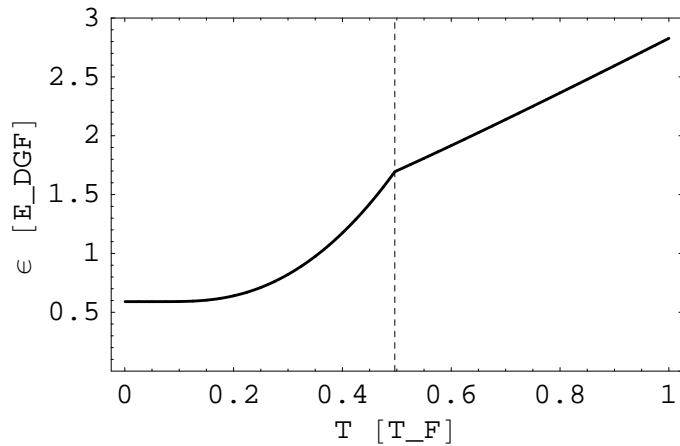
Rysunek 5.7: Szczelina energetyczna w funkcji temperatury. Taki kształt krzywej  $\Delta(T)$  występuje również w prostym modelu Goodmana [14], a także w teorii BCS (por. Rys. 51.1 w [22]). Ten i kolejne wykresy wskazują, że zanik korelacji ma charakter przejścia fazowego.

<sup>21</sup>Metoda FTHFB jest właśnie tego rodzaju przybliżeniem.





Rysunek 5.8: Potencjał chemiczny w funkcji temperatury. Funkcja  $\mu(T)$  ma nieciągłą pochodną w punkcie  $T = T_z$ . Oznacza to (Por. podrozdział 2.1 w [29]), iż mamy tu do czynienia z przejściem fazowym pierwszego rodzaju. Zwróćmy uwagę, że potencjał chemiczny zmienia znak na ujemny w dostatecznie dużej, wyższej od  $T_z$  temperaturze.



Rysunek 5.9: Gęstość energii wewnętrznej w funkcji temperatury. Również funkcja  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$  ma w punkcie  $T = T_z$  nieciągłą pochodną. Dla  $T > T_z$  gęstość energii narasta w przybliżeniu liniowo z temperaturą.

Ciekawy rezultat otrzyma się wykreślając zależność ciepła właściwego w stałej objętości w funkcji temperatury. Aby wielkość ta miała sens, przyjmijmy na chwilę, że nasz układ nie jest nieskończony, ale ma skończoną objętość  $V$ . Jest ona przy tym na tyle duża, że z dala od brzegu wyniki otrzymane dla gazu jednorodnego są wciąż w mocy.

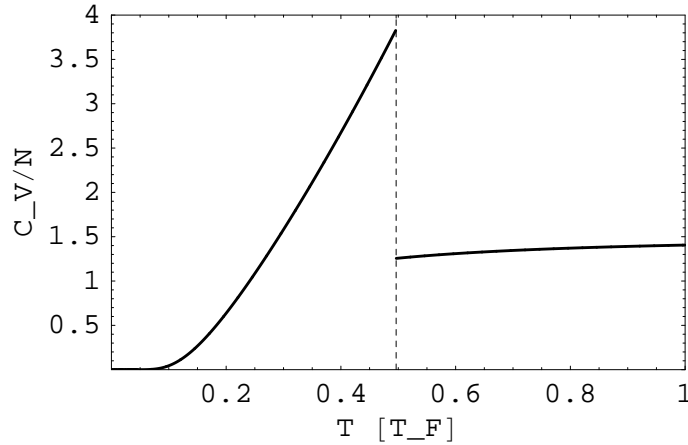
Wtedy z definicji:

$$c_V := \left( \frac{\partial E_{\text{FTHFB}}}{\partial T} \right) \Big|_{V, N = \text{const.}} \quad (5.17)$$

Z przyczyn, które za chwilę staną się jasne, interesować nas będzie wykres funkcji  $\frac{c_V}{N}(T)$ , gdzie  $N := nV$  ma sens liczby cząstek w układzie. Prawdziwa jest równość:

$$\frac{c_V}{N}(T) = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial \epsilon_{\text{FTHFB}}}{\partial T} \right) \Big|_{V=\text{const.}}(T) = \frac{1}{n} \epsilon'_{\text{FTHFB}}(T) \quad (5.18)$$

Żądany wykres możemy zatem otrzymać, obliczając odpowiednie ilorazy różnicowe zebranych przez nas wartości funkcji  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$ . W efekcie otrzymujemy:



Rysunek 5.10: Ciepło właściwe w stałej  $V$  na cząstkę rozrzedzonego gazu Fermiego w granicy unitarnej w funkcji temperatury. Funkcja ta ma nieciągłość w  $T = T_z$ .

Zwróćmy uwagę, że dla  $T > T_z$  funkcja  $\frac{c_V}{N}(T)$  opisuje doskonały gaz Fermiego<sup>22</sup> (por. Rys. 5.4 w [22]). Okazuje się też, że dla  $0 \leq T \leq 0,08 T_F$  funkcję tą można dobrze przybliżyć znaną z teorii BCS formułą<sup>23</sup>:

$$\frac{c_V}{N}(T) \approx C \exp\left(-\frac{\Delta(T)}{T}\right) \quad (5.19)$$

gdzie  $C$  jest pewną stałą, tu równą ok. 50.

Na koniec tego podrozdziału zwróćmy jeszcze uwagę na wyraźnie rosnący charakter funkcji  $\mu(T)$  dla  $T < T_z$ . W dokładniejszych modelach wykorzystujących metody kwantowego Monte Carlo [30] potencjał chemiczny jest w tych temperaturach z dobrym przybliżeniem stały. Najprawdopodobniej efekt ten jest więc wynikiem zgrubności przybliżenia FTHFB.

### 5.4.2 Stabilność równowagi termodynamicznej

Niniejszy rozdział bazuje na wyprowadzeniu zawartym w [31]. Przytoczmy tu najważniejsze elementy tego wyprowadzenia.

<sup>22</sup>Zgadza się to z uwagą poczynioną w podrozdziale 5.1.2 przy omawianiu przypadku  $T > T_z$ .

<sup>23</sup>Por. §36. w [22], pamiętając, że w używanym przez nas układzie jednostek  $k_B = 1$ .

Tak jak uczyniliśmy to podczas badania ciepła właściwego w stałej objętości pod koniec poprzedniego podrozdziału, tak i tu przyjmijmy, że układ ma stałą, skończoną objętość  $V$ , która jest na tyle duża, że z dala od brzegu wciąż stosują się wyniki dotyczące układu jednorodnego.

Zacznijmy od przyjęcia, że prawdziwe jest następujące równanie stanu (por. [21]):

$$E = \frac{3}{5} E_F N \xi(T/T_F) \quad (5.20)$$

gdzie:  $E$  oznacza energię wewnętrzną,  $N$  – liczbę cząstek w układzie, natomiast  $\xi$  jest pewną funkcją<sup>24</sup>.

Takie równanie stanu stanowi bezpośrednią konsekwencję wspomnianej już „uniwersalności” granicy unitarnej.

Posługując się termodynamiczną definicją ciśnienia<sup>25</sup>, w wyniku nietrudnego rachunku można otrzymać, iż:

$$pV = \frac{2}{3} E \quad (5.21)$$

a więc identycznie jak dla gazu doskonałego<sup>26</sup>. Pozwala nam to wyrazić ciśnienie rozrzedzonego gazu Fermiego w granicy unitarnej w przybliżeniu FTHFB po prostu jako:

$$p = \frac{2}{3} \epsilon_{\text{FTHFB}} \quad (5.22)$$

Załóżmy teraz za [30], że prawdziwa jest również następująca zależność termodynamiczna:

$$p(\mu, T) = \frac{2}{5} \beta \left[ Th \left( \frac{\mu}{T} \right) \right]^{5/2} \quad (5.23)$$

gdzie:  $p$  oznacza ciśnienie,  $\beta$  to stała równa w naszym układzie jednostek<sup>27</sup>  $\frac{1}{6\pi^2}$ , natomiast  $h$  jest pewną nieujemną funkcją.

Układ izolowany o stałej objętości  $V$  w stanie równowagi termodynamicznej osiąga minimum energii wewnętrznej [29]. Ze względu na równość (5.21), osiągnie również minimalne ciśnienie. Warunek stabilności tej równowagi (w zadanych  $\mu$  oraz  $T$ ) można więc wyrazić jako dodatnią określoność następującej macierzy drugich pochodnych<sup>28</sup>:

$$H := \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} & \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} \\ \frac{\partial^2 p}{\partial \mu \partial T} & \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

<sup>24</sup>Warto zwrócić uwagę, że jej przebieg w przybliżeniu FTHFB przedstawiony jest na Rys. 5.9.

<sup>25</sup> $p = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right) |_{S, N = \text{const.}}$

<sup>26</sup>Por. np. [22, 29].

<sup>27</sup>Nie ma zatem nic wspólnego z używaną przez nas wcześniej odwrotnością iloczynu temperatury i stałej Boltzmann (4.4).

<sup>28</sup>W rzeczywistości jest to warunek silniejszy niż trzeba, albowiem na mocy równania stanu (5.20) i (5.21) ciśnienie układu o stałej objętości jest funkcją jedynie temperatury, a zatem potencjał chemiczny nie jest tu zmienną niezależną:  $\mu = \mu(T)$ .

Ze znanego twierdzenia Sylwestera<sup>29</sup> wynika, że powyższa macierz jest dodatnio określona wtedy i tylko wtedy, gdy:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} > 0 \quad \text{oraz} \quad \det H > 0 \quad (5.25)$$

Podstawiając (5.23) do (5.25), po elementarnych, acz żmudnych rachunkach można otrzymać warunek równoważny powyższemu:

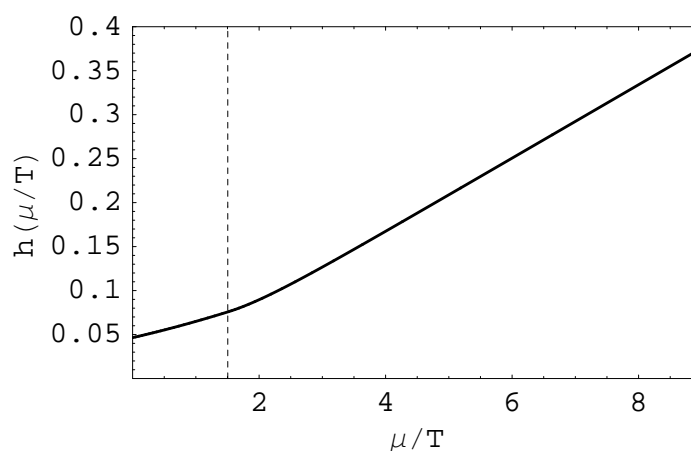
$$H \text{ jest dodatnio określona dla zadanych } \mu, T \Leftrightarrow h''\left(\frac{\mu}{T}\right) > 0 \quad (5.26)$$

Innymi słowy, wypukłość funkcji  $h$  gwarantuje stabilność równowagi mechanicznej (i *vice versa*).

Aby zbadać, czy funkcja  $h$  spełnia warunek (5.26) w przybliżeniu FTHFB, obliczmy jej wartości posługując się wzorem:

$$h\left(\frac{\mu}{T}\right) = \frac{1}{T} \left[ \frac{5}{3\beta} \epsilon_{\text{FTHFB}} \right]^{2/5} \quad (5.27)$$

wynikającym z (5.22) i (5.23) oraz znajomością funkcji  $\mu(T)$  i  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$  otrzymanych w poprzednim podrozdziale<sup>30</sup>. Poniżej przedstawiono wykres funkcji  $h$ :

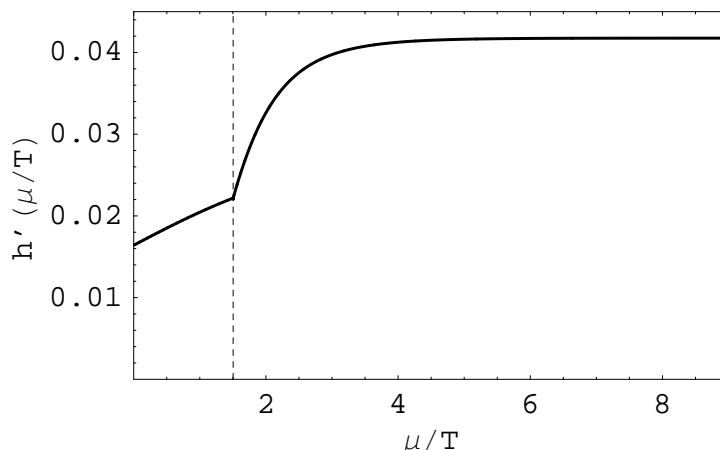


Rysunek 5.11: Wykres funkcji  $h$ . Jako że przyjęliśmy  $k_B = 1$ , zarówno argumenty, jak i wartości tej funkcji są bezwymiarowe. Naniesiono również linię przerywaną o równaniu:  $\mu/T = \mu_z/T_z$ . Na lewo od niej znajduje się zatem faza normalna gazu.

Optycznie nie sposób stwierdzić na pewno, czy funkcja  $h$  jest wszędzie wypukła. Poniżej przedstawiamy zatem wykres tej funkcji po jednokrotnym zróżniczkowaniu:

<sup>29</sup>Por. np. [32], Rozdział V §5.

<sup>30</sup>Por. Rys. 5.8 i 5.9.



Rysunek 5.12: Wykres funkcji  $h'$ . Tu również naniesiono linię przerywaną o równaniu:  $\mu/T = \mu_z/T_z$ , rozgraniczającą dwie fazy gazu.

Funkcja ta jest rosnąca na całym rozważanym przedziale. Oznacza to, że  $h'' > 0$  (z wyjątkiem punktu  $\mu_z/T_z$ , gdzie druga pochodna nie jest określona).

Uzyskaliśmy tu zatem dwa wyniki odnoszące się do rozrzedzonego gazu Fermiego w granicy unitarnej w przybliżeniu FTHFB.

Po pierwsze, założenie (5.23), okazało się słuszne, ponieważ funkcja  $h$  okazała się być dobrze określoną funkcją jednej zmiennej.

Po drugie, zawsze<sup>31</sup> spełniony jest warunek stabilności równowagi termodynamicznej układu.

## 5.5 Poza granicą unitarną. Zależność od $1/a$ .

Niniejszy, ostatni podrozdział stanowi krótką analizę wpływu wartości parametru  $1/a$  na rozwiązanie równań FTHFB. Analiza ta wiąże się zatem z wyjściem poza granicę unitarną. Pozostajemy wszakże w reżimie unitarnym – przejściowym między reżimami BCS i BEC. Przypomnijmy<sup>32</sup>, że reżimowi BCS odpowiada:  $1/a \rightarrow -\infty$  (słabe przyciągające oddziaływanie międzyfermionowe), podczas gdy reżimowi BEC:  $1/a \rightarrow +\infty$  (silne przyciągające oddziaływanie międzyfermionowe).

Badanie, o którym mowa, mogłoby stanowić powielenie przedstawionej w podrozdziale 5.4.1 analizy gazu w granicy unitarnej. Byłby to jednak znaczny przerost formy nad treścią, ponieważ przebiegi zależności  $\Delta(T)$ ,  $\mu(T)$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$  są pod wieloma względami<sup>33</sup> podobne do tych prezentowanych na Rys. 5.7-5.10.

Zasadnicza różnica tkwi natomiast w wartościach takich wielkości jak  $\Delta_0$  czy  $T_z$ . Niniejsza analiza będzie zatem polegać na zbadaniu zależności tych dwu wielkości, a także:

<sup>31</sup>Przynajmniej w rozważanym przedziale wartości zmiennej  $\mu/T$ .

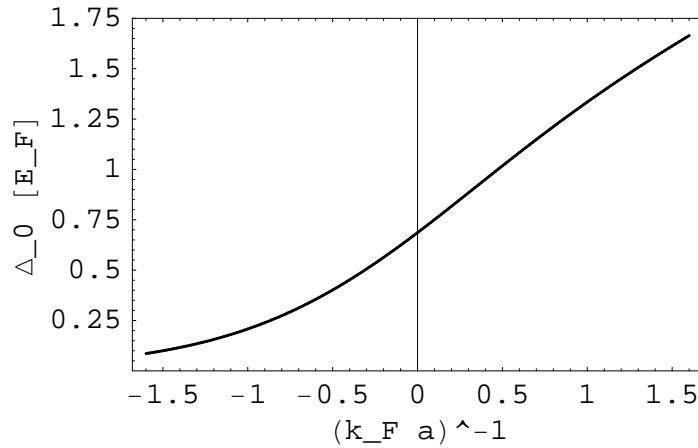
<sup>32</sup>Por. podrozdział 1.3.

<sup>33</sup>Takimi jak monotoniczność, obecność nieciągłości pochodnej w  $T_z$  i ogólne podobieństwo wizualne.

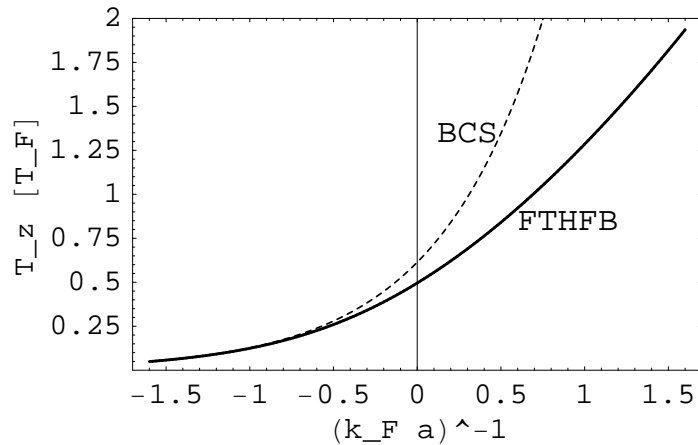
$\mu_0$ ,  $\mu_z$ ,  $\epsilon_{\text{FTHFB0}}$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFBz}}$  w funkcji bezwymiarowej, uniwersalnej i w związku z tym powszechnie stosowanej<sup>34</sup> zmiennej  $(k_F a)^{-1}$ .

Dane zgromadzono w sposób analogiczny jak podczas wypełniania Tabeli 5.2 (podrozdział 5.4.1). Różnica polegała na przyjmowaniu  $1/a \neq 0$ . Konkretniej, obliczenia przeprowadzono dla:  $1/a = \pm \frac{i}{2500} k_F$  gdzie:  $i = 1, 2, \dots, 4000$ . Innymi słowy, rozważono 8000 wartości zmiennej  $(k_F a)^{-1}$  równomiernie rozmieszczonych w przedziale  $[-1, 6; 1, 6]$  (z wyłączeniem zera).

Rezultaty przedstawiono na poniższych wykresach.



Rysunek 5.13: Szczelina energetyczna w stanie podstawowym w funkcji  $(k_F a)^{-1}$ . Narastająca w stronę reżimu BEC wartość  $\Delta_0$  jest konsekwencją rosnącej siły oddziaływania międzyfermionowego.



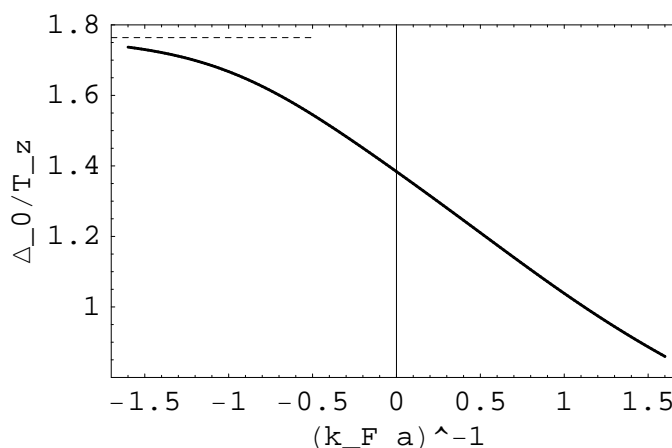
Rysunek 5.14: Temperatura zaniku korelacji w funkcji  $(k_F a)^{-1}$  (objaśnienia poniżej).

Przebieg krzywej „FTHFB” na powyższym wykresie odpowiada dokładnie temu na wykresie Fig.2. w [15]. Krzywa „BCS” dana jest wzorem wynikającym z „prostej” teorii

<sup>34</sup>Por. np. [9, 12, 20, 30].

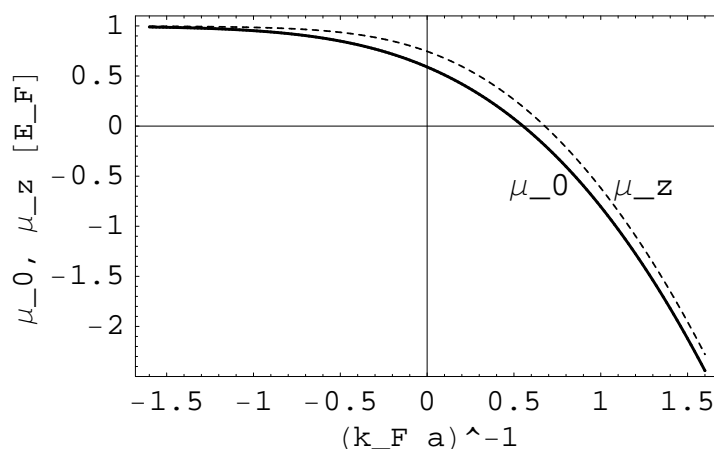
BCS, w której potencjał oddziaływania ma nieznikające elementy macierzowe jedynie dla stanów o energiach bliskich  $E_F$  (por. tamże, podrozdział 3.1). Jak widać, obie krzywe zbiegają się dla  $1/a \rightarrow -\infty$ .

Ciekawy wynik ilustrujący przechodzenie rezultatów metody FTHFB w te znane z „prostej” teorii BCS otrzyma się, wykreślając krzywą  $\frac{\Delta_0}{T_z} \left(\frac{1}{k_F a}\right)$ . W teorii BCS stosunek tych dwu wielkości jest stałą uniwersalną wynoszącą:  $\pi e^{-\gamma} \approx 1,76$  (por. wzór (51.44) w [22]). Tu otrzymujemy:



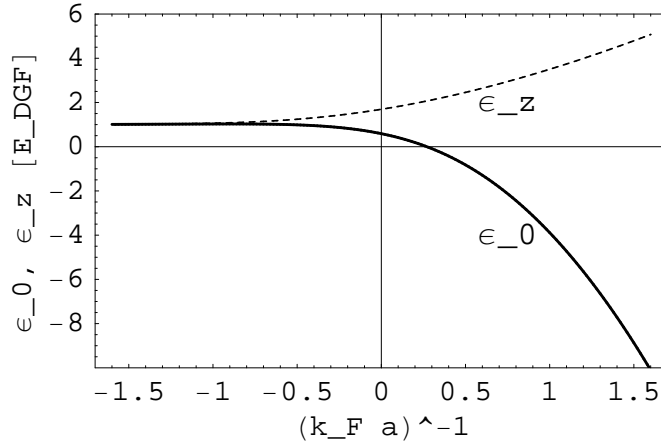
Rysunek 5.15: Stosunek  $\Delta_0$  do  $T_z$  w funkcji  $(k_F a)^{-1}$ . Przerywaną linią w lewym górnym rogu wykresu nakreślono fragment prostej o równaniu  $\Delta_0/T_z = \pi e^{-\gamma}$ . Jak widać, w granicy  $1/a \rightarrow -\infty$  wynik uzyskany metodą FTHFB przechodzi w ten znany z teorii BCS. Z kolei w granicy unitarnej:  $\Delta_0/T_z \approx 1,38$ .

Na kolejnych dwu wykresach gruba linia ciągła odnosi się do wartości danej wielkości w temperaturze zerowej, podczas gdy cienka linia przerywana – do wartości danej wielkości w temperaturze zaniku korelacji.



Rysunek 5.16: Potencjał chemiczny przy  $T = 0$  oraz przy  $T = T_z$  w funkcji  $(k_F a)^{-1}$ .

Przebieg obu krzywych na powyższym wykresie ma podobny charakter, który warto także porównać z Fig.3. w [15]. W rozważanym przedziale zmiennej  $(k_F a)^{-1}$  zawsze:  $\mu_z > \mu_0$ , co jednak najpewniej stanowi artefakt metody FTHFB (por. końcówka podrozdziału 5.4.1).



Rysunek 5.17: Gęstość energii wewnętrznej przy  $T = 0$  oraz przy  $T = T_z$  w funkcji  $(k_F a)^{-1}$ .

Jak widać, wraz z narastaniem siły oddziaływania międzyfermionowego maleje energia stanu podstawowego – cząstki par Coopera tworzą „ciaśniejszy” układ. W reżimie BCS, ponieważ oddziaływanie „czują” jedynie cząstki obsadzające stany bliskie poziomowi Fermiego, energia wewnętrzna w stanie podstawowym jest rzędu energii doskonałego gazu Fermiego.

Jeśli idzie o przebieg krzywej  $\epsilon_{\text{FTHFBz}}$ , to za jego narastanie dla  $1/a \rightarrow +\infty$  odpowiada przede wszystkim narastanie samej temperatury zaniku korelacji.

Zauważmy na koniec, że przy  $1/a \approx 0,55 k_F$  wartość  $\mu_0$  zmienia znak na ujemny. Zgodnie z termodynamiczną definicją potencjału chemicznego<sup>35</sup>, przy  $1/a > 0,55 k_F$  oddziaływanie międzyfermionowe jest już na tyle silne, że ewentualne wprowadzanie do układu kolejnych cząstek prowadziło do zmniejszenia jego energii wewnętrznej.

## 5.6 Podsumowanie

Celem pracy było zastosowanie metody FTHFB do opisu jednorodnego, rozrzedzonego gazu Fermiego w reżimie unitarnym, włącznie z samodzielnym skonstruowaniem efektywnego potencjału oddziaływania międzyfermionowego. Zgodność rezultatów uzyskanych w niniejszej pracy z tymi wynikającymi z teorii pola średniego [9, 12] świadczy o tym, iż cel ten został osiągnięty.

Przybliżenie FTHFB poprawnie przewiduje pojawianie się korelacji w układzie przy dostatecznie niskiej temperaturze. Stanowi przy tym uogólnienie opisu w ramach „prostej”

<sup>35</sup> $\mu = \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right) |_{S, V = \text{const.}}$



teorii BCS, w której oddziałują jedynie cząstki obsadzające stany bliskie poziomowi Fermiego.

Przybliżenie to jest niestety zbyt zgrubne, aby wyodrębnić temperaturę krytyczną  $T_c$ , poniżej której gaz staje się nadprzewodnikiem względnie nadcieczą<sup>36</sup>. Również przewidywane przez metodę FTHFB wartości  $\Delta_0$ ,  $\mu_0$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  okazują się zawyżone w porównaniu do tych uzyskanych w ramach dokładniejszych modeli, jak przedstawiono to w poniższej tabeli (dane, uzyskane metodami QMC, zaczerpnięto z rozdziału IV F pracy przeglądowej [12]):

|       | $\Delta_0 [E_F]$ | $\mu_0 [E_F]$   | $\epsilon_{\text{FTHFB0}} [\epsilon_{\text{DGF}}]$ |
|-------|------------------|-----------------|--|
| FTHFB | 0,68(6)          | 0,59(0)         | 0,59(0)  |
| QMC   | $0,50 \pm 0,03$  | $0,42 \pm 0,01$ | $0,42 \pm 0,01$                                    |

Tablica 5.3: Porównanie wartości trzech wynikających z przybliżenia FTHFB wielkości odnoszących się do gazu w granicy unitarnej z przewidywaniami dokładniejszych modeli opartych na QMC.

Jakkolwiek więc metoda FTHFB poprawnie odtwarza wynikającą z „uniwersalności” granicy unitarnej równość stosunków  $\mu_0/E_F = \epsilon_{\text{FTHFB0}}/\epsilon_{\text{DGF}}$ , to zawyża ich wartość o ok. 30 %. To samo tyczy się wartości szczeliny energetycznej w zerowej temperaturze.

Z drugiej strony, mimo swojej prostoty, metoda FTHFB podaje nienajgorszy *jakościowy* opis przebiegu funkcji termodynamicznych  $\Delta(T)$ ,  $\mu(T)$  oraz  $\epsilon_{\text{FTHFB}}(T)$ , o czym można się przekonać porównując uzyskane krzywe z tymi uzyskanymi metodami QMC [30]. Z przebiegów tych wynika w szczególności stabilność równowagi termodynamicznej gazu w granicy unitarnej (por. podrozdział 5.4.2).

Jako taka, metoda FTHFB dostarczać może pożytecznego pierwszego, średniopoleowego przybliżenia fizyki rozrzedzonego gazu Fermiego w reżimie unitarnym, stanowiąc bazę dla bardziej wyrafinowanych podejść.

---

<sup>36</sup>Według ścisłych, opartych na metodach Kwantowego Monte Carlo (QMC) obliczeniach wynosi ona ok.  $0,16T_F$  [30].

## Rozdział 6

# Dodatek: Uzupełnienie matematyczno-programistyczne

### 6.1 Obliczenie całki $I(\kappa, k_\alpha)$

W tym podrozdziale obliczymy całkę  $I(\kappa, k_\alpha)$  zdefiniowaną w podrozdziale 2.2 wzorem (2.38):

$$I(\kappa, k_\alpha) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\kappa \frac{k^2 dk}{k_\alpha^2 - k^2 + i\varepsilon} \quad (6.1)$$

Zacznijmy od podstawienia:  $x = k_\alpha^2 - k^2$ . Sprowadzi ono powyższą całkę do postaci:

$$I(\kappa, k_\alpha) = \frac{1}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{k_\alpha^2 - \kappa^2}^{k_\alpha^2} \frac{\sqrt{k_\alpha^2 - x}}{x + i\varepsilon} dx \quad (6.2)$$

Taki sposób zapisu umożliwia wygodne skorzystanie ze znanego twierdzenia Sochockiego-Weierstrassa<sup>1</sup> stanowiącego, iż:

$$\frac{1}{x + i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x) \quad (6.3)$$

gdzie powyższą równość należy rozumieć jako *równość dystrybucyjną*, w której poszczególne składniki mają sens następujących dystrybucji:

$$\begin{aligned} \frac{1}{x + i\varepsilon} &: f \mapsto \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{x + i\varepsilon} dx, \\ \mathcal{P} \frac{1}{x} &: f \mapsto \lim_{a \rightarrow 0^+} \left( \int_{-\infty}^{-a} + \int_a^{+\infty} \right) \frac{f(x)}{x} dx, \\ \delta(x) &: f \mapsto f(0). \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>Por. np. (12.64) w [8], a także (7.17) w [24], gdzie jednak twierdzenie to pozostaje bezimiennie.

Oznaczenie  $\mathcal{P}$  występujące w drugiej z powyższych dystrybucji zadaje pewną szczególną metodę obliczania niektórych całek niewłaściwych (podaną powyżej). Wynik zastosowania tej metody nazywa się *wartością główną*<sup>2</sup> danej całki.

Trzecia z powyższych dystrybucji to oczywiście delta Diraca.

Stosując twierdzenie Sochockiego-Weierstrassa do (6.2), otrzymujemy:

$$I(\kappa, k_\alpha) = -\frac{1}{2}\pi i k_\alpha + \frac{1}{2} \lim_{a \rightarrow 0^+} \left( \int_{k_\alpha^2 - \kappa^2}^{-a} + \int_a^{k_\alpha^2} \right) \frac{\sqrt{k_\alpha^2 - x}}{x} dx \quad (6.4)$$

W tym momencie wygodnie wrócić do pierwotnych oznaczeń. Dokonując odwrotnego podstawienia:  $k = \sqrt{k_\alpha^2 - x}$ , otrzymamy:

$$I(\kappa, k_\alpha) = -\frac{1}{2}\pi i k_\alpha + \lim_{a \rightarrow 0^+} \left( \int_0^{\sqrt{k_\alpha^2 - a}} + \int_{\sqrt{k_\alpha^2 + a}}^\kappa \right) \frac{k^2}{k_\alpha^2 - k^2} dk \quad (6.5)$$

Aby znaleźć całkę nieoznaczoną funkcji  $\frac{k^2}{k_\alpha^2 - k^2}$ , można posłużyć się klasyczną metodą całkowania funkcji wymiernych<sup>3</sup>. Okazuje się, iż:

$$\int \frac{k^2}{k_\alpha^2 - k^2} dk = -k + \frac{k_\alpha}{2} \ln \frac{k_\alpha + k}{k_\alpha - k} + C \quad (6.6)$$

gdzie  $C$  to stała całkowania.

Podstawiając (6.6) do (6.5), otrzymamy:

$$I(\kappa, k_\alpha) = -\frac{1}{2}\pi i k_\alpha - \kappa + \frac{k_\alpha}{2} \lim_{a \rightarrow 0^+} \left[ \ln \frac{k_\alpha + \kappa}{k_\alpha - \kappa} - \ln \frac{k_\alpha + \sqrt{k_\alpha^2 + a}}{k_\alpha - \sqrt{k_\alpha^2 + a}} + \ln \frac{k_\alpha + \sqrt{k_\alpha^2 - a}}{k_\alpha - \sqrt{k_\alpha^2 - a}} \right] \quad (6.7)$$

Do pojawiającej się tu granicy nie można przejść od razu, albowiem pojawi się wyrażenie nieoznaczone typu  $\infty - \infty$ . Zamieniając jednak sumę logarytmów na logarytm iloczynów, a następnie wchodząc z limesem pod znak logarytmu<sup>4</sup> oraz stosując jednorazowo regułę de l'Hôpitala, ostatecznie (pomijamy tu żmudne rachunki) otrzymamy wynik oznaczony w niniejszej pracy numerem (2.39):

$$I(\kappa, k_\alpha) = \frac{k_\alpha}{2} \left( \ln \frac{\kappa + k_\alpha}{\kappa - k_\alpha} - i\pi \right) - \kappa \quad (6.8)$$

## 6.2 Zbieżność całek niewłaściwych

W tym podrozdziale udowodnimy zbieżność całek niewłaściwych (3.91) oraz (3.101) oraz ich odpowiedników w przypadku niezerowych temperatur: (4.50) oraz (4.58).

<sup>2</sup>Por. np. Rozdział 7.4. w [24].

<sup>3</sup>Por. Rozdział VIII §2. w [32].

<sup>4</sup>Korzystamy tu z ciągłości funkcji  $\ln x$ .

Zauważmy na wstępie, że wszystkie funkcje podcałkowe w rozważanych całkach są ciągłe, a zatem całkwalne na przedziałach ograniczonych<sup>5</sup>. Dzięki temu, możemy swobodnie wybrać dolną granicę całkowania  $k_d$ . Innymi słowy, wystarczy, że pokażemy zbieżność rozważanych całek niewłaściwych obliczanych na przedziale  $(k_d, +\infty)$ . Jak się za chwilę okaże, wygodnie będzie przyjąć, iż zawsze  $k_d > \sqrt{|\mu|}$ .

Kluczowe w poniższych dowodach są następujące nierówności:

$$\begin{aligned} \forall x > -1 & \quad 1 - \frac{1}{\sqrt{1+x}} \leq \frac{1}{2}x \\ \forall x \in (-1, 0) & \quad \frac{1}{\sqrt{1+x}} - 1 < \frac{-x}{1+x} \\ \forall x \geq 0 & \quad \frac{1}{\sqrt{1+x}} - 1 \leq -\frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 \end{aligned} \quad (6.9)$$

Pierwszy z powyższych faktów wynika z nierówności:  $\frac{1}{\sqrt{1+x}} \geq 1 - \frac{1}{2}x$ , którą można łatwo udowodnić za pomocą twierdzenia Lagrange'a (o wartości średniej). Druga nierówność wynika z trywialnej relacji  $1 + x < \sqrt{1+x}$  spełnionej dla ujemnych  $x$ . Trzecią można prostymi przekształceniami algebraicznymi sprowadzić do równoważnej postaci:

$$x^3(9x^2 - 15x + 40) \geq 0 \quad (6.10)$$

w oczywisty sposób spełnioną dla nieujemnych  $x$ .

Przejdźmy teraz do pierwszej z całek (3.91). Dla większej przejrzystości przyjmiemy, że:  $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ .

Pokażemy, że funkcja:

$$1 - \frac{k^2}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \quad (6.11)$$

jest bezwzględnie całkwalna (po  $k$ ) na przedziale  $(0, +\infty)$ .

Istotnie, moduł tej funkcji można ograniczyć z góry przez funkcję całkwalną, co jest warunkiem wystarczającym jego całkwalności<sup>6</sup>. Aby to wykazać, skorzystamy z dwóch pierwszych nierówności (6.9) dla  $x = -\frac{2\mu}{k^2} + \frac{1}{k^4}(\mu^2 + \Delta^2)$ :

$$\begin{aligned} \left| 1 - \frac{k^2}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right| &= \left| 1 - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2\mu}{k^2} + \frac{1}{k^4}(\mu^2 + \Delta^2)}} \right| \leq \\ &\leq \begin{cases} \frac{1}{2k^4}(\mu^2 + \Delta^2) - \frac{\mu}{k^2} & \text{dla } 2\mu k^2 \leq (\mu^2 + \Delta^2) \\ \frac{2\mu k^2 - (\mu^2 + \Delta^2)}{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2} & \text{dla } 2\mu k^2 > (\mu^2 + \Delta^2) \end{cases} \leq \\ &\leq \begin{cases} \frac{1}{2k^4}(\mu^2 + \Delta^2) + \frac{|\mu|}{k^2} & \text{dla } 2\mu k^2 \leq (\mu^2 + \Delta^2) \\ \frac{2|\mu|k^2}{(k^2 - \mu)^2} & \text{dla } 2\mu k^2 > (\mu^2 + \Delta^2) \end{cases} \leq \\ &\leq \frac{\mu^2 + \Delta^2}{2k^4} + \frac{|\mu|}{k^2} + \frac{2|\mu|k^2}{(k^2 - \mu)^2} \end{aligned} \quad (6.12)$$

<sup>5</sup>Por. Rozdział IX §1. w [32].

<sup>6</sup>Por. Twierdzenie 1., Rozdział XIII §1. w [32].

Ponieważ funkcja podcałkowa może przyjmować zarówno wartości dodatnie, jak i ujemne, zmuszeni byliśmy rozważyć dwa przypadki, posługując się raz pierwszą, raz drugą z nierówności (6.9). Znalazłszy dodatnie ograniczenia górne dla każdego z tych przypadków, w ostatnim przejściu dokonaliśmy ich zsumowania, otrzymując wspólną dla ich obu funkcję ograniczającą.

Funkcja ta jest całkowalna na przedziale  $(k_d, +\infty)$ , gdzie:  $k_d > \sqrt{|\mu|}$ . Dowód tego stwierdzenia polega albo na żmudnym, ale nietrudnym obliczeniu całki z tej funkcji wymiernej, albo na powołaniu się na kryterium całkowalności Cauchy'ego<sup>7</sup>. Wynika stąd bezwzględna całkowalność funkcji (6.11).

Podobnie pokażemy teraz, że funkcja:

$$\left(1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}}\right) k^2 \quad (6.13)$$

jest bezwzględnie całkowalna (po  $k$ ) na przedziale  $(0, +\infty)$ .

Istotnie, dla  $k > \sqrt{|\mu|}$ :

$$\left|\left(1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}}\right) k^2\right| = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{(k^2 - \mu)^2}}}\right) k^2 \leq \frac{\Delta^2 k^2}{2(k^2 - \mu)^2} \quad (6.14)$$

Tym razem, jako że wyrażenie podpierwiastkowe jest zawsze niemniejsze niż 1, funkcja (6.13) jest nieujemna. Skorzystanie z pierwszej z nierówności (6.9) pozwala otrzymać ograniczenie górne, będące funkcją całkowalną na przedziale  $(k_d, +\infty)$ , gdzie:  $k_d > \sqrt{|\mu|}$ . Tak jak poprzednio, całkowalność tej funkcji (wymiernej) można wykazać albo bezpośrednim rachunkiem, albo powołując się na kryterium Cauchy'ego. Kończy to dowód bezwzględnej całkowalności funkcji (6.13).

Pokażemy wreszcie, że funkcja:

$$\left(1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}}\right) k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \quad (6.15)$$

jest bezwzględnie całkowalna (po  $k$ ) na przedziale  $(0, +\infty)$ .

---

<sup>7</sup>Por. Rozdział XIII §1. w [32].

Istotnie, korzystając tym razem z pierwszej i trzeciej z nierówności (6.9), w których położono  $x = \frac{\Delta^2}{(k^2 - \mu)^2}$ , otrzymamy (dla  $k > \sqrt{|\mu|}$ ):

$$\begin{aligned}
& \left| \left( 1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \right| = \left| \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{(k^2 - \mu)^2}}} \right) k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \right| \leq \\
& \leq \begin{cases} \frac{\Delta^2}{2} \left( \frac{k^4}{(k^2 - \mu)^2} - 1 \right) & \text{dla } \left( 1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) k^4 \geq \frac{\Delta^2}{2} \\ \frac{\Delta^2}{2} \left( 1 - \frac{k^4}{(k^2 - \mu)^2} + \frac{3\Delta^2 k^4}{4(k^2 - \mu)^4} \right) & \text{dla } \left( 1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) k^4 < \frac{\Delta^2}{2} \end{cases} = \\
& = \begin{cases} \frac{\Delta^2(2\mu k^2 - \mu^2)}{2(k^2 - \mu)^2} & \text{dla } \left( 1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) k^4 \geq \frac{\Delta^2}{2} \\ -\frac{\Delta^2(2\mu k^2 - \mu^2)}{2(k^2 - \mu)^2} + \frac{3\Delta^4 k^4}{8(k^2 - \mu)^4} & \text{dla } \left( 1 - \frac{k^2 - \mu}{\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \right) k^4 < \frac{\Delta^2}{2} \end{cases} \leq \\
& \leq \frac{\Delta^2(2|\mu|k^2 + \mu^2)}{2(k^2 - \mu)^2} + \frac{3\Delta^4 k^4}{8(k^2 - \mu)^4}
\end{aligned} \tag{6.16}$$

Zatem również moduł funkcji (6.15) daje się ograniczyć z góry przez funkcję wymierną, całkowalną na przedziale  $(k_d, +\infty)$ , gdzie:  $k_d > \sqrt{|\mu|}$ . Analogicznie jak miało to miejsce w poprzednich dwu przypadkach, stanowi to dowód, iż funkcja (6.15) jest bezwzględnie całkowalna.

Przejdziemy teraz do dowodu zbieżności całek w (4.50) oraz (4.58). Jak pokażemy poniżej, dowód ten można przeprowadzić tak, że w zasadniczej części stanowi on wniosek z wykazanej przed chwilą bezwzględnej całkowalności funkcji (6.11), (6.13) i (6.15).

Istotnie, rozważmy funkcję podcałkową pierwszej z interesujących nas całek<sup>8</sup>:

$$1 - \frac{k^2}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \tag{6.17}$$

gdzie:  $E_k := \sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}$

Moduł tej funkcji można oszacować z góry następująco:

$$\begin{aligned}
\left| 1 - \frac{k^2}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \right| & \leq [1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] + \left| 1 - \frac{k^2}{E_k} \right| \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right) \leq \\
& \leq [1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] + \left| 1 - \frac{k^2}{E_k} \right|
\end{aligned} \tag{6.18}$$

W pierwszym przejściu dodano i odjęto odpowiedni tangens hiperboliczny oraz skorzystano z nierówności:  $|a \pm b| \leq |a| + |b|$ . W drugim przejściu stojący w drugim składniku tangens hiperboliczny oszacowano z góry przez 1.

<sup>8</sup>Dla przejrzystości wciąż przyjmujemy, iż:  $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ .

Zwróćmy uwagę, że absolutną całkowalność drugiego składnika w (6.18) udowodni-  
liśmy już za pomocą ciągu nierówności (6.12) oraz następującej po nim dyskusji. Pozostaje  
zatem jedynie pokazać, że własność tą posiada również funkcja:  $1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)$ .

Zanim jednak tego dokonamy, rozważmy pozostałe dwie interesujące nas funkcje pod-  
całkowe:

$$\left[1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)\right] k^2 \quad (6.19)$$

$$\text{oraz} \quad \left[1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)\right] k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \quad (6.20)$$

Oszacujmy z góry ich moduły w podobny sposób jak uczyniliśmy to w (6.18). Dla  
funkcji (6.19) mamy:

$$\left|1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)\right| k^2 \leq [1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] k^2 + \left|1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k}\right| k^2 \quad (6.21)$$

Z kolei dla funkcji (6.20) możemy zapisać:

$$\begin{aligned} & \left| \left[1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)\right] k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \right| \leq \\ & \leq [1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] \left(k^4 + \frac{\Delta^2}{2}\right) + \left| \left(1 - \frac{k^2 - \mu}{E_k}\right) k^4 - \frac{\Delta^2}{2} \right| \end{aligned} \quad (6.22)$$

Analogicznie jak miało to miejsce w dyskusji do wzoru (6.18), całkowalności drugich  
składników w powyższych oszacowaniach dowiedziano już wcześniej<sup>9</sup>. Teraz wystarczy  
jedynie, że wykażemy całkowalność następującej (dodatniej) funkcji:

$$[1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] k^n \quad (6.23)$$

dla  $n = 0, 2, 4$ . Można wszakże pokazać, że funkcja ta jest całkowalna na przedziale  $(0, +\infty)$   
dla dowolnej liczby naturalnej  $n$ .

Istotnie, prawdziwy jest ciąg nierówności:

$$[1 - \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k\right)] k^n \leq \frac{2k^n}{1 + \exp \beta E_k} \leq 2k^n e^{-\beta\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \leq 2k^n e^{\beta|\mu|} e^{-\beta k^2} \quad (6.24)$$

Całka z otrzymanego powyżej ograniczenia górnego, stanowiącego iloczyn jednomianu  
i funkcji Gaussa, obliczona na przedziale  $(0, +\infty)$ , *istnieje*<sup>10</sup>. Implikuje to całkowalność  
funkcji (6.23). To z kolei, na mocy całej przedstawionej powyżej argumentacji, gwarantuje  
nam już zbieżność całek (4.50) oraz (4.58).

Na koniec zwróćmy uwagę, że całkowalność funkcji (6.23) była już przez nas milcząco  
zakładana w podrozdziale 4.3. Istotnie, gdyby tak nie było, wówczas warunki (4.44)  
i (4.56) nałożone na pęd obciążenia  $k_c$  nie miałyby sensu.

<sup>9</sup>Por. wzory (6.14), (6.16) i dyskusja do nich.

<sup>10</sup>Jej wartość nie jest tu najistotniejsza; można ją znaleźć np. z pomocą [33] lub dowolnych innych  
tablic całek.

## 6.3 Najważniejsze bloki instrukcji

Niniejszy podrozdział zawiera kluczowe fragmenty bloków instrukcji napisanych w środowisku (i języku) *Mathematica*, stworzonych specjalnie na potrzeby tej pracy.

Przez „kluczowe fragmenty” należy rozumieć ten zestaw instrukcji, który służył do rozwiązywania układu równań FTHFB oraz obliczania gęstości energii wewnętrznej  $\epsilon_{\text{FTHFB}}$  dla zadanych parametrów wejściowych. Pomijamy więc tu komendy inicjalizujące zmienne, wyświetlające wyniki na ekranie, a także pętle przemiatające cały zakres wartości rozważanej zmiennej kontrolnej, w których to pętlach umieszczone były wyżej wymienione instrukcje.

Tak jak opisano w podrozdziale 5.1.2, rozwiązując numerycznie równania FTHFB, należy rozważyć cztery przypadki. Układ tego podrozdziału jest więc taki jak podrozdziału 5.1.2. Poszczególne bloki instrukcji zamieszczono poniżej i opatrzone je krótkim komentarzem.

Przypadek  $T = 0$ .

```
int1[d_?NumericQ, m_?NumericQ]:=NIntegrate[1 - k^2/Sqrt[(k^2 + Γ - m)^2 + d^2],
{k, 0, kc/2}, AccuracyGoal → 5, MaxRecursion → 20, GaussPoints → 18];
```

```
int2[d_?NumericQ, m_?NumericQ]:=
NIntegrate[(1 - (k^2 + Γ - m)/Sqrt[(k^2 + Γ - m)^2 + d^2]) k^2,
{k, 0, kc/2}, AccuracyGoal → 5, MaxRecursion → 20, GaussPoints → 18];
```

```
{Δ0, μ0} =
{d, m}/.FindRoot[{1/2(σπ/a) == int1[d, m], 2π^2 n == int2[d, m]}, {d, dmin, dmax},
{m, mmin, mmax}, MaxIterations → 500, AccuracyGoal → 4];
```

```
ε = NIntegrate[k^4 (1 + 1/Sqrt[1 + (Δ0/(k^2 + Γ - μ0))^2]) - Δ0^2/2,
{k, 0, Sqrt[μ0 - Γ]},
AccuracyGoal → 4, MaxRecursion → 15, WorkingPrecision → 50, GaussPoints → 18];
```

```
ε += NIntegrate[k^4 (1 - 1/Sqrt[1 + (Δ0/(k^2 + Γ - μ0))^2]) - Δ0^2/2,
{k, Sqrt[μ0 - Γ], 30kF},
AccuracyGoal → 4, MaxRecursion → 15, WorkingPrecision → 50, GaussPoints → 18];
```

```
ε +=
(Δ0^2
(kc^5 (1125kF^2 (2Γ - Δ0 - 2μ0) (2Γ + Δ0 - 2μ0) - 8100000kF^4 (Γ - μ0) -
(-3Δ0^2 + 4(Γ - μ0)^2) (Γ - μ0)) - 243000000kc^2kF^5 (2Γ - Δ0 - 2μ0) (2Γ + Δ0 - 2μ0) +
486000000kc^4kF^5 (Γ - μ0) + 777600000kF^5 (-3Δ0^2 + 4(Γ - μ0)^2) (Γ - μ0)))
```



$$/243000000k_c^5k_F^5;$$

$$\epsilon/=2\pi^2;$$

$$\epsilon+=\Delta_0^2\sigma/(8\pi^2a) - 2\pi^2n^2/(k_c - \sigma\pi/a);$$

Dwie pierwsze instrukcje to definicje całek pojawiających się po prawej stronie równań (5.4)-(5.5). Zmienne  $d$  i  $m$  mające sens szczeliny energetycznej i potencjału chemicznego są tu parametrami.

Komenda *NIntegrate* wywołuje adaptacyjny algorytm całkowania numerycznego funkcji zadanej jako pierwszy argument<sup>11</sup>. Drugi argument zadaje zmienną i przedział całkowania (od 0 do  $k_c/2$ ). Dalej następuje specyfikacja szeregu opcji takich jak żądana dokładność<sup>12</sup> wyniku całkowania (*AccuracyGoal*).

Trzecia instrukcja to numeryczne rozwiązanie równań FTHFB (5.4)-(5.5) zakończone przypisaniem rozwiązań do zmiennych<sup>13</sup>  $\Delta_0$  i  $\mu_0$ . Odbywa się to za pomocą komendy *FindRoot*, która w tym wypadku posługuje się dwuwymiarowym wariantem metody siecznych<sup>14</sup>.

Pierwszym argumentem jest lista dwóch równań do rozwiązania. Drugim i trzecim – przedziały, w których ma znajdować się rozwiązanie (trzeba je podać samemu). Dalej następuje specyfikacja dwóch opcji: maksymalnej liczby iteracji algorytmu (*MaxIterations*) oraz żądanej dokładności wyniku (*AccuracyGoal*).

Nadmieńmy, że konieczność samodzielnego określania przedziałów, w których *FindRoot* poszukiwał rozwiązania nie była znaczącym ograniczeniem. Zwłaszcza, że odpowiednio zagęszczając zbiór wartości zmiennej kontrolnej, jako „przedział poszukiwań” można było wziąć bliskie otoczenie ostatnich uzyskanych wartości badanej wielkości.

Ostatnie kilka komend to podzielone na etapy obliczanie gęstości energii wewnętrznej ze wzoru (5.12). Wyrażenia podcałkowe są tu zapisane w postaci, która okazała się minimalizować (ale nie eliminować) zjawisko szumu numerycznego opisane w podrozdziale 5.1.3. Instrukcja trzecia od dołu zawiera wycałkowane na przedziale  $(30k_F, k_c/2)$  asymptotyczne wyrażenie (5.16).

**Przypadek**  $0 < T < T_z$

```
int3[d_?NumericQ, m_?NumericQ, b_?NumericQ]:=
NIntegrate[1 - k^2/Sqrt[(k^2 + Γ - m)^2 + d^2] Tanh[b Sqrt[(k^2 + Γ - m)^2 + d^2]/2],
{k, 0, k_c/2}, AccuracyGoal -> 5, MaxRecursion -> 20, GaussPoints -> 12];
```

<sup>11</sup>Por. *Mathematica 5.2 Help Browser*.

<sup>12</sup>Wyrażona w liczbie „wiarygodnych” cyfr znaczących.

<sup>13</sup>*Mathematica* pozwala posługiwać się indeksami dolnymi i górnymi (mającymi sens wykładników potęg).

<sup>14</sup>Por. tamże.

int4[d\_?NumericQ, m\_?NumericQ, b\_?NumericQ]:=

NIntegrate[

$k^2$

$(1 - (k^2 + \Gamma - m) / \text{Sqrt}[(k^2 + \Gamma - m)^2 + d^2]$

$\text{Tanh}[b \text{Sqrt}[(k^2 + \Gamma - m)^2 + d^2] / 2],$

$\{k, 0, k_c/2\}, \text{AccuracyGoal} \rightarrow 5, \text{MaxRecursion} \rightarrow 20, \text{GaussPoints} \rightarrow 12];$

$\{\Delta, \mu\} = \{d, m\} / . \text{FindRoot}[\{1/2(\sigma\pi/a) == \text{int3}[d, m, 1/T], 2\pi^2 n == \text{int4}[d, m, 1/T]\},$   
 $\{d, \text{dmin}, \text{dmax}\}, \{m, \text{mmin}, \text{mmax}\}, \text{MaxIterations} \rightarrow 500, \text{AccuracyGoal} \rightarrow 4];$

$\epsilon = \text{NIntegrate}[k^4$

$(1 + \text{Tanh}[\text{Sqrt}[(k^2 + \Gamma - \mu)^2 + \Delta^2] / (2T)] / \text{Sqrt}[1 + (\Delta / (k^2 + \Gamma - \mu))^2]) - \Delta^2 / 2,$

$\{k, 0, \text{Sqrt}[\mu - \Gamma]\},$

$\text{AccuracyGoal} \rightarrow 4, \text{MaxRecursion} \rightarrow 15, \text{WorkingPrecision} \rightarrow 50, \text{GaussPoints} \rightarrow 12];$

$\epsilon += \text{NIntegrate}[k^4$

$(1 - \text{Tanh}[\text{Sqrt}[(k^2 + \Gamma - \mu)^2 + \Delta^2] / (2T)] / \text{Sqrt}[1 + (\Delta / (k^2 + \Gamma - \mu))^2]) - \Delta^2 / 2,$

$\{k, \text{Sqrt}[\mu - \Gamma], 30k_F\},$

$\text{AccuracyGoal} \rightarrow 4, \text{MaxRecursion} \rightarrow 15, \text{WorkingPrecision} \rightarrow 50, \text{GaussPoints} \rightarrow 12];$

$\epsilon += (\Delta^2 (k_c^5 (1125k_F^2 (2\Gamma - \Delta - 2\mu)(2\Gamma + \Delta - 2\mu) - 8100000k_F^4 (\Gamma - \mu) -$   
 $(-3\Delta^2 + 4(\Gamma - \mu)^2) (\Gamma - \mu)) - 243000000k_c^2 k_F^5 (2\Gamma - \Delta - 2\mu)(2\Gamma + \Delta - 2\mu) +$   
 $486000000k_c^4 k_F^5 (\Gamma - \mu) + 777600000k_F^5 (-3\Delta^2 + 4(\Gamma - \mu)^2) (\Gamma - \mu))$   
 $/ 243000000k_c^5 k_F^5;$

$\epsilon /= 2\pi^2;$

$\epsilon += \Delta^2 \sigma / (8\pi^2 a) - 2\pi^2 n^2 / (k_c - \sigma\pi/a);$

Powyższy zestaw instrukcji jest niemal identyczny jak w przypadku  $T = 0$ . Różni się przede wszystkim obecnością tangensów hiperbolicznych w wyrażeniach podcałkowych.

Analogicznie jak poprzednio, dwie pierwsze instrukcje to definicje całek pojawiających się po prawej stronie równań (5.7)-(5.8). Zmienna  $b$  stanowi trzeci parametr tych całek, mający sens odwrotności temperatury.

Trzecia instrukcja to numeryczne rozwiązanie ww. równań wraz z przypisaniem rozwiązań do zmiennych  $\Delta, \mu$ . Przypomnijmy, że temperatura  $T$  jest tu zadana.

Na końcu następuje podzielone na kilka etapów obliczanie gęstości energii wewnętrznej ze wzoru (5.13). Tu również posługujemy się „metodą asymptotyczną” wprowadzoną w podrozdziale 5.1.3.

Przypadek  $T = T_z$

```
int5[t_?NumericQ, m_?NumericQ]:=
NIntegrate [1 - k^2 Tanh [(k^2 + Γ - m)/(2t)] / (k^2 + Γ - m),
{k, 0, k_c/2}, AccuracyGoal → 5, MaxRecursion → 20, GaussPoints → 18];
```

```
int6[t_?NumericQ, m_?NumericQ]:=
NIntegrate [(1 - Tanh [(k^2 + Γ - m)/(2t)]) k^2,
{k, 0, k_c/2}, AccuracyGoal → 5, MaxRecursion → 20, GaussPoints → 18];
```

```
{T_z, μ_z} =
{t, m} /. FindRoot [{1/2(σπ/a) == int5[t, m], 2π^2 n == int6[t, m]}, {t, tmin, tmax},
{m, mmin, mmax}, MaxIterations → 500, AccuracyGoal → 4];
```

```
ε = NIntegrate [k^4 (1 - Tanh [(k^2 + Γ - μ_z)/(2T_z))],
{k, 0, 30k_F},
AccuracyGoal → 4, MaxRecursion → 15, WorkingPrecision → 50, GaussPoints → 18];
```

$\epsilon / = 2\pi^2;$

$\epsilon + = -2\pi^2 n^2 / (k_c - \sigma\pi/a);$

Tym razem do rozwiązania są równania (5.9)-(5.10), których rozwiązaniem jest para  $T_z, \mu_z$ . Dlatego zamiast zmiennej  $d$  w definicjach całek *int5* i *int6* w liście parametrów występuje zmienna  $t$ , mająca sens temperatury zaniku korelacji.

W trzeciej instrukcji, analogicznie jak poprzednio, w celu rozwiązania ww. równań wykorzystywana jest komenda *FindRoot* wraz z przypisaniem znalezionych przez nią rozwiązań do zmiennych o nazwach  $T_z$  i  $\mu_z$ .

Znacznemu uproszczeniu ulega natomiast procedura obliczania gęstości energii wewnętrznej (wzór (5.14)). W szczególności, dzięki temu, że znika szczelina energetyczna, zeruje się rozwinięcie asymptotyczne (5.16).

Funkcja  $w(k)$  (5.15) jest rzecz jasna dodatnia, dlatego ściślej rzecz biorąc, powinniśmy poprawić nasze rozwinięcie asymptotyczne. Można jednak pokazać (dowód pomijamy), że jego wyraz wiodący jest proporcjonalny do:  $k^{-2} \exp\left(-\frac{k^2 + \Gamma - \mu_z}{T_z}\right)$ . Możemy je więc zaniedbać.

Przypadek  $T > T_z$

```
int7[m_?NumericQ, b_?NumericQ]:=
NIntegrate [k^2 (1 - Tanh [b (k^2 + Γ - m)/2]),
```

$\{k, 0, k_c/2\}$ , AccuracyGoal  $\rightarrow 5$ , MaxRecursion  $\rightarrow 20$ , GaussPoints  $\rightarrow 12$ ];

$\mu = m/.FindRoot [2\pi^2 n == \text{int}7[m, 1/T],$   
 $\{m, \text{mmin}, \text{mmax}\}, \text{MaxIterations} \rightarrow 500, \text{AccuracyGoal} \rightarrow 4];$

$\epsilon = \text{NIntegrate} [k^4 (1 - \text{Tanh} [(k^2 + \Gamma - \mu)/(2T)]),$   
 $\{k, 0, 30k_F\},$   
AccuracyGoal  $\rightarrow 4$ , MaxRecursion  $\rightarrow 15$ , WorkingPrecision  $\rightarrow 50$ , GaussPoints  $\rightarrow 18$ ];

$\epsilon /= 2\pi^2;$

$\epsilon += -2\pi^2 n^2 / (k_c - \sigma\pi/a);$

Ostatni przypadek jest równocześnie najprostszy.

Najpierw następuje definicja całki pojawiającej się po prawej stronie równania (5.11). Całka ta ma tylko jeden parametr  $m$ , mający sens potencjału chemicznego.

Następnie wspomniane równanie jest rozwiązywane za pomocą komendy *FindRoot*, tym razem w wersji jednowymiarowej.

Na koniec obliczana jest gęstość energii wewnętrznej. Następuje to w identyczny sposób jak w przypadku  $T = T_z$ .

# Bibliografia

- [1] Anderson M.H., Ensher J.R., Matthews M.R., Wieman C.E., Cornell E.A., *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science 269, 198 (1995);
- [2] Bradley C.C., Sackett C.A., Tollett J.J., Hulet R.G., *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, Phys. Rev. Lett. 75, 1687 (1995);
- [3] Davis K.B., Mewes M.-O., Andrews M.R., van Druten N.J., Durfee D.S., Kurn D.M., Ketterle W. *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. 75, 3969 (1995);
- [4] De Marco B., Jin D.S., *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science 285, 1703 (1999);
- [5] Truscott A.G., Strecker K.E., McAlexander W.I., Partridge G.B., Hulet R.G., *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*, Science 291, 2570 (2001);
- [6] Schreck F., Khaykovich L., Corwin K.L., Ferrari G., Bourdel T., Cubizolles J., Salomon C., *Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea*, Phys. Rev. Lett. 87, 080403 (2001);
- [7] Schiff L. *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1977;
- [8] Elster Ch., *Quantum Mechanics (lecture notes)*, Ohio University, Athens 2004;
- [9] Leggett A.J. *Diatomic Molecules and Cooper Pairs*, w: Pekalski A., Przystawa j. (red.) *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, Proc. XVI Karpacz Winter School of Theoretical Physics, Springer, Berlin, 1980;
- [10] Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R., *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. 108, 1175 (1957);
- [11] Regal C.A., Ticknor C., Bohn J.L., Jin D.S., *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*, Nature 424, 47 (2003);
- [12] Giorgini S., Pitaevskii L.P., Stringari S. *Theory of ultracold atomic Fermi gases*, Rev. Mod. Phys. 80, s. 1215–1274 (2008);

- [13] Dobaczewski J. *Teoria układów jądrowych (skrypt do wykładu)*, IFT UW, Warszawa 2003;
- [14] Goodman A.L. *Finite Temperature HFB theory*, Nuclear Physics A 352 (1981) s. 30-44;
- [15] Randeria M. *Crossover from BCS Theory to Bose-Einstein Condensation* w: Griffin A., Snoke D.W., Stringari S. (red.) *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge University Press, Cambridge 1995;
- [16] Bethe H.A. *Theory of the Effective Range in Nuclear Scattering*, Phys. Rev. 76, 38-50 (1949);
- [17] Bogner S.K., Furnstahl R.J., Perry R.J., Schwenk A., *Are low-energy nuclear observables sensitive to high-energy phase shifts?*, Phys. Lett. B 649, 488 (2007);
- [18] Stoks V.G.J., Klomp R.A.M., Rentmeester M.C.M., de Swart J.J. *Partial-wave analysis of all nucleon-nucleon scattering data below 350 MeV*, Phys. Rev. C 48, 792 (1993);
- [19] Eagles D.M. *Possible Pairing without Superconductivity at Low Carrier Concentrations in Bulk and Thin-Film Superconducting Semiconductors*, Phys. Rev. 186(2), 456 (1969);
- [20] Wlazłowski G., *Zbadanie właściwości rozrzedzonego gazu silnie oddziałujących fermionów metodą Monte Carlo*, rozprawa doktorska na Wydziale Fizyki PW, Warszawa 2010;
- [21] Ho T.-L. *Universal Thermodynamics of Degenerate Quantum Gases in the Unitarity Limit*, Phys. Rev. Lett. 92(9), 090402 (2004);
- [22] Fetter A.L., Walecka J.D. *Kwantowa teoria układów wielu cząstek*, PWN, Warszawa 1982;
- [23] Bég M.A.B., Furlong R.C.  $\lambda\varphi^4$  *theory in the nonrelativistic limit*, Phys. Rev. D 31 (1985), s. 1370;
- [24] Zagórski A. *Metody matematyczne fizyki*, Oficyna Wydawnicza PW, Warszawa 2001;
- [25] Griffiths D.J. *Podstawy elektrodynamiki*, PWN, Warszawa 2006;
- [26] Bjorken J.D., Drell S.D. *Relatywistyczna teoria kwantów*, PWN, Warszawa 1985;
- [27] Zwierlein M.W., Schirotzek A., Schunck C.H., Ketterle W. *Fermionic Superfluidity with Imbalanced Spin Populations and the Quantum Phase Transition to the Normal State*, Science 311, 492 (27 Jan 2006);
- [28] Partridge G.B., Li W., Kamar R.I., Liao Y., Hulet R.G. *Pairing and Phase Separation in a Polarized Fermi Gas*, Science 311, 503 (27 Jan 2006);

- [29] Huang K., *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, New York 1987;
- [30] Bulgac A., Drut J.E., Magierski P., *Quantum Monte Carlo simulations of the BCS-BEC crossover at finite temperature*, Phys. Rev. A 78, 023625 (2008);
- [31] Magierski P., *Thermodynamics of the unitary gas*, nieopublikowane;
- [32] Fichtenholz G.M. *Rachunek różniczkowy i całkowy*, PWN, Warszawa 2007;
- [33] Mizerski W. (red.) *Tablice matematyczne*, Adamantan, Warszawa 2001;

# Spis rysunków

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.1 | Diagram fazowy rozrzedzonej materii fermionowej. . . . .   | 9  |
| 5.1 | Fragment wykresu funkcji $w(k)$ obliczonej numerycznie dla ww. parametrów wejściowych. Już dla $k$ rzędu kilkunastu $k_F$ zauważalny staje się szum numeryczny, który w miarę narastania uniemożliwia numeryczne całkowanie tej funkcji. . . . .   | 66 |
| 5.2 | Fragment wykresu funkcji (5.16), stanowiącej asymptotyczną postać funkcji $w(k)$ . Parametry wejściowe oraz zakresy obu osi są identyczne jak poprzednio. Można zauważyć, że przebieg krzywej wykresu odpowiada temu z lewej części Rys. 5.1, wolnej od szumu numerycznego. Samo zjawisko szumu na powyższym wykresie nie pojawia się. . . . .           | 66 |
| 5.3 | $\Delta_0$ w funkcji pędu obciążenia. W granicy dużych $k_c$ wartość szczeliny energetycznej w temperaturze $T = 0$ stabilizuje się na poziomie ok. $1,333 E_F$ . .  | 68 |
| 5.4 | $\epsilon_{\text{TFHB0}}$ w funkcji pędu obciążenia. W granicy dużych $k_c$ wartość gęstości energii w temperaturze $T = 0$ stabilizuje się na poziomie ok. $-3,875 \epsilon_{\text{DGF}}$ . .   | 68 |
| 5.5 | Widmo energii jednokwazicząstkowych. Dla przejrzystości wykreślono je w funkcji $T_{\text{kin}}(k) := k^2$ , tj. energii kinetycznej. Linia przerywana, przerzucona przez „szczelinę” oddzielającą oś odciętych od krzywej wykresu ma długość $\Delta$ . Stąd właśnie bierze się nazwa tej ostatniej wielkości – <i>szczelina energetyczna</i> . . . . . | 71 |
| 5.6 | Rozkład prawdopodobieństwa obsadzeń stanów jednocząstkowej bazy pędowej w stanie podstawowym układu. Jak widać, istnienie korelacji prowadzi do obsadzenia stanów powyżej poziomu Fermiego. . . . .  | 71 |
| 5.7 | Szczelina energetyczna w funkcji temperatury. Taki kształt krzywej $\Delta(T)$ występuje również w prostym modelu Goodmana [14], a także w teorii BCS (por. Rys. 51.1 w [22]). Ten i kolejne wykresy wskazują, że zanik korelacji ma charakter przejścia fazowego. . . . .   | 72 |
| 5.8 | Potencjał chemiczny w funkcji temperatury. Funkcja $\mu(T)$ ma nieciągłą pochodną w punkcie $T = T_z$ . Oznacza to (Por. podrozdział 2.1 w [29]), iż mamy tu do czynienia z przejściem fazowym pierwszego rodzaju. Zwróćmy uwagę, że potencjał chemiczny zmienia znak na ujemny w dostatecznie dużej, wyższej od $T_z$ temperaturze. . . . .             | 73 |
| 5.9 | Gęstość energii wewnętrznej w funkcji temperatury. Również funkcja $\epsilon_{\text{TFHB}}(T)$ ma w punkcie $T = T_z$ nieciągłą pochodną. Dla $T > T_z$ gęstość energii narasta w przybliżeniu liniowo z temperaturą. . . . .  | 73 |



|      |   |    |
|------|---|----|
| 5.10 | Ciepło właściwe w stałej $V$ na cząstkę rozrzedzonego gazu Fermiego w granicy unitarnej w funkcji temperatury. Funkcja ta ma nieciągłość w $T = T_z$ . . . . .  | 74 |
| 5.11 | Wykres funkcji $h$ . Jako że przyjęliśmy $k_B = 1$ , zarówno argumenty, jak i wartości tej funkcji są bezwymiarowe. Naniesiono również linię przerywaną o równaniu: $\mu/T = \mu_z/T_z$ . Na lewo od niej znajduje się zatem faza normalna gazu. . . . .  | 76 |
| 5.12 | Wykres funkcji $h'$ . Tu również naniesiono linię przerywaną o równaniu: $\mu/T = \mu_z/T_z$ , rozgraniczającą dwie fazy gazu. . . . .  | 77 |
| 5.13 | Szczelina energetyczna w stanie podstawowym w funkcji $(k_F a)^{-1}$ . Narastająca w stronę reżimu BEC wartość $\Delta_0$ jest konsekwencją rosnącej siły oddziaływania międzyfermionowego. . . . .   | 78 |
| 5.14 | Temperatura zaniku korelacji w funkcji $(k_F a)^{-1}$ (objaśnienia poniżej). . . . .  | 78 |
| 5.15 | Stosunek $\Delta_0$ do $T_z$ w funkcji $(k_F a)^{-1}$ . Przerywaną linią w lewym górnym rogu wykresu nakreślono fragment prostej o równaniu $\Delta_0/T_z = \pi e^{-\gamma}$ . Jak widać, w granicy $1/a \rightarrow -\infty$ wynik uzyskany metodą FTHFB przechodzi w ten znany z teorii BCS. Z kolei w granicy unitarnej: $\Delta_0/T_z \approx 1,38$ . . . . . | 79 |
| 5.16 | Potencjał chemiczny przy $T = 0$ oraz przy $T = T_z$ w funkcji $(k_F a)^{-1}$ . . . . .   | 79 |
| 5.17 | Gęstość energii wewnętrznej przy $T = 0$ oraz przy $T = T_z$ w funkcji $(k_F a)^{-1}$ . . . . .   | 80 |

# Spis tablic

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 5.1 | Przykładowy zestaw wyników uzyskany podczas badania ich zależności od $n$ , słuszny dla wszystkich rozważanych wartości koncentracji. . . . .  | 67 |
| 5.2 | Podstawowe wielkości charakteryzujące gaz Fermiego w granicy unitarnej w przybliżeniu FTHFB. . . . .   | 70 |
| 5.3 | Porównanie wartości trzech wynikających z przybliżenia FTHFB wielkości odnoszących się do gazu w granicy unitarnej z przewidywaniami dokładniejszych modeli opartych na QMC. . . . . | 81 |