Bose-Einstein kondenzáció

Vizsgálódásunk elején tegyük fel, hogy elég nagy hőmérsékleten vagyunk! A korábbiakat, Soktestprobléma I előadáson tanultakat idézzük fel! Bozonokra a Hamilton operátor:

$$H = \underbrace{\sum_{\mathbf{k},s} e_k a^+_{\mathbf{k},s} a_{\mathbf{k},s}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \\ s,s'}} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s} a^+_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},s'} a_{\mathbf{k}',s'} a_{\mathbf{k},s}}_{H_1}$$

ahol H_1 perturbáció.

Nagykanonikus sokaság termodinamikai potenciálja: $K = H - \mu N = K_0 + K_1$, ahol $K_0 = H_0 - \mu N$. A perturbálatlan, H_0 -hoz tartozó rendszer Green-függvénye, vagyis a szabad Green-függvény is tavalyról ismeretes:

$$G_0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}$$

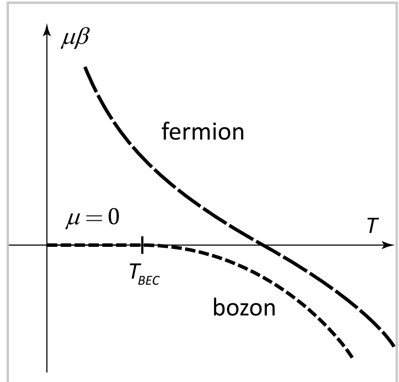
ahol bevezettük a $e_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ jelölést. A teljes rendszer Green-függvénye pedig

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu) - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

valamint a teljes részecskeszám:

$$N(T,V,\mu) = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{-1}{\beta\hbar} \sum_n G(\mathbf{k}, i\omega_n) e^{i\omega_n \eta}$$

ahol η a konvergencia faktor, ami az időrendezés sorrendjét állítja be (azaz a számolások végén elvégezhetjük a $\lim\limits_{\eta \to 0}$ határesetet).



A bozonok görbéje hozzásimul a tengelyhez.

A részecskék száma a Bose-Einstein eloszlás alapján:

$$N'(T,V,\mu) = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu) - 1}}$$

, melyben az integrandust a

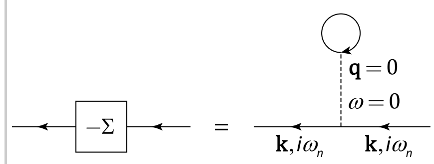
$$-\frac{1}{\beta\hbar} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}} - \mu)}}$$

összefüggésből kaptuk. Az integrális kifejezés akkor helyénvaló, ha a betöltési-szám függvény elég sima. Bose-Einstein kondenzáció felléptekor pont ez a közelítés nem alkalmazható, ugyanis a legalacsonyabb energiás állapot betöltöttsége makroszkópikus lesz. A későbbiekben majd úgy számolunk, hogy az integrálást tulajdonképp a $\mathbf{k} \neq 0$ állapotokra kell csak elvégezni, a $\mathbf{k} = 0$ esetet pedig külön kiszámolni Ugyanakkor elvégezhetjük az integrálást a teljes impulzustérre, hisz egy pontot kihagyva (aminek a mértéke 0) az integrál értéke nem változik az integrandus exponenciális függése miatt.

Tudjuk, hogy $\mu \leq 0$ stabilitási feltételnek teljesülnie kell. Ahhoz, hogy N visszaadja valóban a teljes részecskeszámot, ehhez hozzá kell még adni a $\mathbf{k} = 0$ állapotú részecskéket, így a teljes részecskeszám $T < T_{BEC}$ hőmérsékleten: $N(T, V, \mu = 0) = N' + N_0$, ahol N_0 a Bose-Einstein kondenzációban (BEC) lévő részecskék száma, hullámszámvektoruk $\mathbf{k} = 0$.

Hartree-közelítés

$-\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(-\hbar^{-1}\right) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \underbrace{\frac{1}{\beta\hbar} \sum_m -G_0(\mathbf{q}, i\omega_n) e^{i\omega_n \eta}}_{\frac{1}{e^{\beta(e_q - \mu)} - 1} = n^{(0)}(\mathbf{q})} \cdot v(0)$, ahol $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta\hbar}$ a Matsubara-frekvencia. $\hbar\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v(0) n^{(0)}(\mathbf{q})$, melyből $v(0)$ kivihető az integrálás elé, így



Hartree-diagram

$$-\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} v(0) n^{(0)}(\mathbf{q}) = v(0) n$$

ahol $n = N/V$.

A Hartree-propagátor így:

$$G^H(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k + nv(0) - \mu)}$$

ahol $\omega_n = \frac{2\pi m}{\beta\hbar}$

BEC.: $\mu = nv(0)$, $e_k^H := e_k + nv(0)$

$$G^H(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}\left(e_k^H - \mu\right)} = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu_0)}$$

ahol $\mu_0 = \mu - nv(0)$. Általánosan akkor következik be Bose-Einstein kondenzáció, amikor $\mu = \hbar\Sigma(0,0)$ lesz.

T_C meghatározása

$T = T_c$ épp akkor, amikor $\mu_0 = 0$, de még $N_0 = 0$.

$$N = V(2s + 1) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta_c e_k} - 1}$$

ahol $\beta_c = \frac{1}{k_B T_{BEC}}$. Számoljuk ki az integrált! Vezessük be a $\beta_C e_k = \frac{\beta_c \hbar^2 k^2}{2m} = x^2$, vagyis $x = \sqrt{\frac{\beta_c \hbar^2}{2m}} \cdot k$ rövidítést dimenziótlanítás végett! Ekkor

$$N = \frac{V \cdot (2s + 1)}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{2m}{\beta_c \hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^2}{e^{x^2} - 1}$$

Vezessük be: $t = x^2 \Rightarrow dt = 2xdx \Rightarrow x^2 dx = \frac{1}{2}\sqrt{t}dt$. Ekkor

$$N = \frac{V(2s+1)}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\beta_c \hbar^2}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^\infty dt \frac{t^{1/2}}{e^t - 1}}_{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\cdot\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \Rightarrow k_B T_{BEC} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4\pi^2}{(2s+1)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left[\left(\frac{3}{2}\right)\right]}\right)^{2/3} \cdot \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \approx \frac{\hbar^2}{(2s+1)^{2/3}} n^{2/3} \frac{3{,}31}{m}$$

vagyis láthatjuk, hogy a kritikus hőmérséklet a Hartree-közelítésben nem változik az ideális gázmodell közelítéséhez képest.

T_c alatti eset tárgyalása

$N = N_0 + N'$, ahol $N' = V(2s+1)\int \frac{dk^3}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta e_k} - 1} = N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$. Ekkor $N_0 = N - N' = N \cdot \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right)$. Ez csak $T \approx T_c$ esetén igaz, mert minél kisebb T , annál több atom lesz a kondenzátumban, márpedig mi a kölcsönhatást nem vettük figyelembe a kondenzátumban levő atomokra. Későbbiekben ezt figyelembe kell venni, azaz a kondenzált atom kondenzált atomon történő szóródását.

Kölcsönható Bose gáz 0 hőmérsékleten

Az előző képletet, ha megnézzük, $T = 0$ esetén $N_0 = N$. Ha van kölcsönhatás is, az kiszór atomokat a kondenzátumból, de első közelítésben azt mondjuk, hogy ez nagyon kicsi, vagyis hogy $N_0 \approx N$, és hogy a kölcsönhatás nagyon gyenge. A Hamilton operátor az eddig felírt, azaz

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e_k a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}$$

ahol $a_0|BEC\rangle = \sqrt{N}|BEC\rangle_{N-1}$, melyben $|BEC\rangle = |N,0,0,...\rangle$. Ugyanígy $a_0^+|BEC\rangle_N = \sqrt{N+1}|BEC\rangle_{N+1}$. Bogo azt mondta, hogy $N - 1 \approx N \approx N + 1$ ha $N \to \infty$. Ekkor az ún. Bogoljubov-előírás: $a_0 = a_0^+ = \sqrt{N}$. (Tudjuk, hogy $\left[a_k, a_{k'}^+\right] = \delta_{k,k'}$, azaz $\left[a_0, a_0^+\right] = 1$, most pedig $\left[a_k, a_{k'}^+\right] = 0$, azaz a felcserélési relációt elrontjuk. A hiba $1/N$ -es , de ez nem olyan nagy, mert ekkora hibát akkor is elkövetünk, ha azt mondjuk, hogy egy véges rendszerben fázisátalakulás megy végbe, pedig végesben ez sosem megy végbe). Cseréljük le ezeket az operátorokat a Hamilton operátorban! Vegyük figyelembe, hogy mely kombinációkban fordulhatnak elő a keltő és eltüntető operátorok 0 indexű változatai! Ekkor

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V}\sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q} \\ \mathbf{k}\neq 0 \neq \mathbf{k}' \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0 \\ \mathbf{k}'-\mathbf{q}\neq 0}} v(q) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} + \sqrt{\frac{n_0}{V}}\sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{q} \\ \mathbf{k}\neq 0 \\ \mathbf{k}+\mathbf{q}\neq 0 \\ \mathbf{q}\neq 0}} v(q)\left(\underbrace{a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{k}'=\mathbf{q}} + \underbrace{a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{k}'=0}\right) +$$

$$+ n_0 v(0) \overbrace{\sum_{\substack{\mathbf{k} \\ k\neq 0}} \underbrace{a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}}_{\text{ha } \mathbf{q}=0 \text{ és } \mathbf{k}'=0}}^{n'} + n_0 \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ q\neq 0}} v(\mathbf{q}) \underbrace{a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}}}_{\text{ha } \mathbf{k}=0 \text{ és } \mathbf{q}=\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} n_0 \sum_{\substack{\mathbf{q} \\ q\neq 0}} v(\mathbf{q})\left(\underbrace{a_{\mathbf{q}}^+ a_{-\mathbf{q}}^+}_{\text{ha } \mathbf{k}'=\mathbf{k}=0} + \underbrace{a_{\mathbf{q}} a_{-\mathbf{q}}}_{\text{ha } -\mathbf{k}=\mathbf{q}=\mathbf{k}'}\right) + \underbrace{\overbrace{\frac{V}{2} n_0^2 v(0)}^{\approx \frac{V}{2} n^2 v(0) - 2\frac{V}{2} n' n_0 v(0)}}_{\text{ha } \mathbf{k}=\mathbf{k}'=0 \text{ és } \mathbf{k}=\mathbf{q}}$$

ahol $n_0 = N_0/V$ és $n' = N'/V$. Feltételezzük, hogy a 2. és 3. tagok kicsik, valamint az n_0 -t nem tartalmazó tagokat elhagytuk. Jó lenne, ha n_0 -t eliminálhatnánk. Feltettük, hogy $n' \ll n_0$, emiatt $n = n_0 + n' \approx n_0$, illetve $n^2 = (n_0 + n')^2 = n_0^2 + 2n_0 n'^2 \approx n_0^2 + 2n_0 n'$. Ezt írjuk be a Hamilton operátorba, s írjuk be a közelítéseket!

$$H = \frac{V}{2} n^2 v(0) + \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k}\neq 0}} (e_\mathbf{k} + nv(\mathbf{k})) a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k} + \frac{1}{2} n \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k}\neq 0}} v(\mathbf{k}) \left(a_\mathbf{k} a_{-\mathbf{k}} + a_\mathbf{k}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ \right) + \frac{1}{2} n \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ \mathbf{k}\neq 0}} v(\mathbf{k}) \left(a_\mathbf{k} a_{-\mathbf{k}} + a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k}^+ \right)$$

Szeretnénk diagonalizálni ezt a Hamilton operátort, azaz

$$H = \sum_\mathbf{k} E(\mathbf{k}) \alpha_\mathbf{k}^+ \alpha_\mathbf{k} + E_0$$

alakra hozni, ahol $\alpha_\mathbf{k} |BEC\rangle = 0$. Vegyük $\alpha_\mathbf{k}$ és $\alpha_\mathbf{k}^+$ -nak a következőket, majd ellenőrizzük le a felcserélési relációkat:

$\alpha_\mathbf{k} = u_\mathbf{k} a_\mathbf{k} - v_\mathbf{k} a_{-\mathbf{k}}^+$, illetve $\alpha_{-\mathbf{k}}^+ = u_\mathbf{k} a_{-\mathbf{k}}^+ - v_\mathbf{k} a_\mathbf{k}$, tegyük fel továbbá, hogy $u_\mathbf{k} = u_k$ és $v_\mathbf{k} = v_k$, azaz $\mathbf{k}$ -nak csak az abszolút értékétől függ, illetve u_k és v_k is valós. Kell, hogy teljesítsék a felcserélési relációt, azaz $\left[\alpha_\mathbf{k}, \alpha_{\mathbf{k}'}^+\right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$. A definíciójukból eredően ez feltételt ró u_k és v_k paraméterekre:

$$\left[\alpha_\mathbf{k}, \alpha_{\mathbf{k}'}^+\right] = u_k u_{k'} \left[a_\mathbf{k}, a_{\mathbf{k}'}^+\right] - v_k v_{k'} \left[a_{-\mathbf{k}'}, a_{-\mathbf{k}}^+\right] = \left(u_k^2 - v_k^2\right) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \Rightarrow \boxed{u_k^2 - v_k^2 = 1}$$

Ezek segítségével algebrai úton kifejezhető az eredeti keltő és eltüntető operátor:

$$a_\mathbf{k} = u_k \alpha_\mathbf{k} + v_k \alpha_{-\mathbf{k}}^+$$

$$a_\mathbf{k}^+ = u_k \alpha_\mathbf{k}^+ + v_k \alpha_{-\mathbf{k}}$$

Ekkor a Hamilton-operátort a $H = U + H_{11} + H_{20}$ alakban írhatjuk, ahol

$$U = \frac{V}{2} n^2 v(0) + \sum_\mathbf{k} \left[(e_k + nv(0)) v_k^2 + nv(k) u_k v_k \right]$$

$$H_{11} = \sum_\mathbf{k} \left[(e_k + nv(k)) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) + 2nv(\mathbf{k}) u_k v_k \right] \alpha_\mathbf{k}^+ \alpha_\mathbf{k}$$

$$H_{20} = \sum_\mathbf{k} \underbrace{\left[(e_k + nv(\mathbf{k})) u_k v_k + \frac{1}{2} nv(\mathbf{k}) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) \right]}_{\text{ez legyen } = 0 \text{, mert akkor } H \text{ diagonális lesz}} \left(\alpha_k \alpha_{-k} + \alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ \right)$$

Ezeknek a megoldása, vagyis a

$$u_k^2 - v_k^2 = 1$$

$$(e_k + nv(\mathbf{k})) u_k v_k + \frac{1}{2} nv(\mathbf{k}) \left(u_k^2 + v_k^2 \right) = 0$$

egyenletrendszernek: $u_k = \operatorname{ch} \chi_k$, illetve $v_k = \operatorname{sh} \chi_k$, ahol χ_k tetszőleges függvény. Erre a χ_k -ra további megszorításokat tehetünk.

Tehát előző órán láttuk, hogy u_k és v_k -ra az alábbi feltételek adódtak: $u_k^2 - v_k^2 = 1$ és $[e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})]u_k v_k + nv(\mathbf{k})\left(u_k^2 + v_k^2\right) = 0$. Utóbbi abból jött, hogy azt akartuk, hogy $\alpha_{\mathbf{k}}$ és $\alpha_{\mathbf{k}}^+$ bevezetésével a Hamilton operátor diagonális legyen, azaz a $H = U + H_{11} + H_{20}$ egyenletből a H_{20} tagra $H_{20} = 0$ fennálljon. $u_k = \operatorname{ch}\chi_k$ és $v_k = \operatorname{sh}\chi_k$ választással $u_k^2 - v_k^2 = 1$ egyenletet azonnal kielégítettük.

A sh és ch függvények azonosságait felhasználva vegyük észre a következőket!

$$2u_k v_k = \operatorname{sh}(2\chi_k)$$

$$u_k^2 + v_k^2 = \operatorname{ch}(2\chi_k)$$

Felhasználva, hogy H -t diagonálisnak szeretnénk,

$$\operatorname{th}(2\chi_k) = -\frac{nv(\mathbf{k})}{e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})}$$

adódik. Ebből $\operatorname{sh}(2\chi_k) = -\frac{nv(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}$ és $\operatorname{ch}(2\chi_k) = \frac{e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}$ adódik, ahol $E(\mathbf{k})$ még nem biztos, hogy épp a korábban keresett. Visszaírva azonban a sh és ch függvények kétszeres szögértékeit az egyszeresekre, s ezt behelyettesítve a még ki nem elégített egyenletre, láthatjuk, hogy az teljesül, így $E(\mathbf{k})$ valóban a keresett mennyiséggel egyenlő.

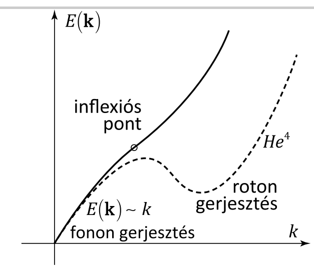
Ebből már kifejezhető $E(\mathbf{k})$:

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{[e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})]^2 + n^2 v^2(\mathbf{k})} = E_{\mathbf{k}}$$

továbbá

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} + 1\right]$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{e_{\mathbf{k}} + nv(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}} - 1\right]$$



A kvázirészecskék diszperziós relációja

Ábrázolhatjuk az $E(\mathbf{k})$ függvényt. Kicsi $\mathbf{k}$ esetén $E_{\mathbf{k}} \approx \sqrt{2nv(0)e_{\mathbf{k}}} \sim k$, mivel $e_{\mathbf{k}} \sim \mathbf{k}^2$, tehát lineárisként indul a függvény. Ezeket a gerjesztéseket nevezhetjük fononoknak. A közelítésben feltettük, hogy a kölcsönhatás gyenge, így az erős kölcsönhatásokat nem tudja leírni, ami pl. a rotonokat okozza (pl He^4 esetében). Állítás, hogy a gyenge kölcsönhatású közelítés az inflexiós környékét jól leírja.

A kondenzátumon kívüli atomok száma

$$N' = \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \langle BEC|a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}|BEC\rangle = \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \langle BEC|v_k^2 \alpha_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}}^+ + \underbrace{u_k^2 \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}}_{0\text{ járulék}} + \ldots|BEC\rangle = \sum_{\mathbf{k}\neq 0} v_k^2 = V\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_k^2$$

Ahol az összegre vonatkozó közelítést (határátmenetet) alkalmaztuk. A szög szerinti integrálást elvégezve

$$N' = V\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dk \cdot k^2 \, \frac{1}{2}\left[-1 + \frac{e_k + nv(0)}{E_k}\right]$$

Használjuk a $\frac{e_k}{nv(0)} = z^2$ helyettesítést, ekkor $z = k\xi_B$ és $\xi_B = \frac{\hbar}{\sqrt{2mnv(0)}}$, így

$$N' = \frac{V}{4\pi^2}\frac{1}{\xi_B^3}\int_0^\infty dz \cdot z^2 \left[-1 + \frac{z^2+1}{\left(z^4+2z^2\right)^{1/2}}\right] = \frac{8N}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{na^3} + \ldots$$

ahol az a szórási hosszt a $v(0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ egyenlet definiálja. Ez a potenciál az $\mathbf{r}$ helyen:

$$v(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta^{(3)}(\mathbf{r})$$

Láthatjuk, hogy $a = 0$ esetén – ami a kölcsönhatás nélküli gáznak felel meg – nincs a kondenzátumon kívül részecske, azaz $N' = 0$.

$$N_0 = N - N' = N\left[1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \cdot \underbrace{\sqrt{na^3}}_{\text{D.lan param, } \ll 1} + \ldots\right]$$

Kondenzált Bose rendszerek véges hőmérsékleten

Perturbációszámítás, nem ideális gáz vizsgálata

A Hamilton operátor:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4}$$

ahol $v(\mathbf{k}) = 4\pi\hbar^2 a/m$. $K = H - \mu N$.

$T < T_c$ esetén előírjuk, hogy $\langle a_0 \rangle = \sqrt{N_0}$. Ez persze csalás, de nem baj. Milyen szimmetria sérül ezáltal? Nézzük az $a_{\mathbf{k}} \mapsto a_{\mathbf{k}} e^{i\Theta}$ és a $a_{\mathbf{k}}^+ \mapsto a_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\Theta}$ transzformációt! Ez a (globális) $U(1)$ szimmetria (szimmetria, azaz a transzformációt elvégezhetjük a mérhető paraméterek változása nélkül). A megadott előírás ezt sérti. Goldstone tétele szerint pedig sérülő folytonos (globális) szimmetria gap nélküli gerjesztéseket eredményez. Vezessük be a

$$b_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}} - \sqrt{N_0}\delta_{\mathbf{k},0}$$

és a

$$b_{\mathbf{k}}^+ = a_{\mathbf{k}}^+ - \sqrt{N_0}\delta_{\mathbf{k},0}$$

jelöléseket! Most írjuk be ezt a Hamilton operátorba! Vigyázat, hosszú lesz!

$$\sum_{\mathbf{k}} (e_k - \mu) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} (e_k - \mu)\left(b_{\mathbf{k}}^+ + \sqrt{N_0}\delta_{\mathbf{k},0}\right)\left(b_{\mathbf{k}} + \sqrt{N_0}\delta_{\mathbf{k},0}\right) =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} (e_k - \mu)\left[b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + N_0\left(b_{\mathbf{k}}^+ + b_{\mathbf{k}}\right)\delta_{\mathbf{k},0} + N_0\delta_{\mathbf{k},0}\right] = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} \left(e_{\mathbf{k}} - \mu\right) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}}_{K_0} - \underbrace{\mu\sqrt{N}\left(b_0 + b_0^+\right)}_{K_1'} - \underbrace{\mu N_0}_{K_0'}$$

A kölcsönhatási rész:

$$\frac{v(0)}{2V} \cdot \sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} = K_{I,4} + K_{I,3} + K_{I,1} + K_{I,0}$$

ahol

$$K_{I,4}=\frac{1}{2V}\cdot\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} b^+_{\mathbf{k}_1}b^+_{\mathbf{k}_2}b_{\mathbf{k}_3}b_{\mathbf{k}_4}v(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)$$

$$K_{I,3}=\frac{\sqrt{N_0}v(0)}{2V}\cdot\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}}\left(b^+_{\mathbf{k}_1}b^+_{\mathbf{k}_2}b_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_4,0}+b^+_{\mathbf{k}_1}b^+_{\mathbf{k}_2}b_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_3,0}+b^+_{\mathbf{k}_1}b_{\mathbf{k}_3}b_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_2,0}+b^+_{\mathbf{k}_2}b_{\mathbf{k}_3}b_{\mathbf{k}_4}\delta_{\mathbf{k}_1,0}\right)$$

$$K_{I,2}=\frac{N_0}{2V}\cdot\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}}\begin{pmatrix} b^+_{\mathbf{k}_1}b^+_{\mathbf{k}_2}\delta_{\mathbf{k}_3,0}\delta_{\mathbf{k}_4,0}+b^+_{\mathbf{k}_1}\delta_{\mathbf{k}_2,0}b_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_4,0}+\delta_{\mathbf{k}_1,0}b^+_{\mathbf{k}_2}b_{\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_4,0}+\\ +\delta_{\mathbf{k}_1,0}b^+_{\mathbf{k}_2}\delta_{\mathbf{k}_3,0}b_{\mathbf{k}_4}+b^+_{\mathbf{k}_1}\delta_{\mathbf{k}_2,0}\delta_{\mathbf{k}_3,0}b_{\mathbf{k}_4}+\delta_{\mathbf{k}_1,0}\delta_{\mathbf{k}_2,0}b_{\mathbf{k}_3}b_{\mathbf{k}_4}\end{pmatrix}v(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)$$

$$K_{I,1}=\frac{N_0^{3/2}}{2V}v(0)\left(2b_0^++2b_0\right)$$

valamint

$$K_{I,0}=\frac{N_0^2}{2V}v(0)$$

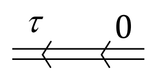
Így tömör írásmódban

$$U=K_0+\sum_{i=0}^{4}K_{I,i}+K_0'+K_1'$$

Green-függvény

Definiáljuk a következő Green-függvényeket!

$$G_{1,1}(\mathbf{k},\tau):=-\langle T_\tau\left[b_{\mathbf{k}}(\tau)\cdot b^+_{\mathbf{k}}(0)\right]\rangle$$



ahol az operátor τ függése ezt jelenti:

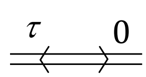
$$O(\tau)=e^{\frac{K\tau}{\hbar}}O_Se^{-\frac{K\tau}{\hbar}}$$

várható értéke

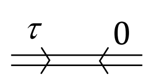
$$\langle O\rangle=Sp(\rho_GO)$$

ahol $\rho_G=e^{\frac{-\beta K}{Z_G}}$ Ebből látszik, hogy a vannak olyan operátorok, melyek várható értéke nem 0, noha megváltoztatják a részecskeszámot. Soktestprobéma I órán ezt a Green-függvényt használtuk. Az új, további függvények:

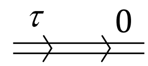
$$G_{1,2}(\mathbf{k},\tau)=-\langle T_\tau[b_{-\mathbf{k}}(\tau)b_{\mathbf{k}}(0)]\rangle$$



$$G_{2,1}(\mathbf{k},\tau)=-\langle T_\tau\left[b^+_{-\mathbf{k}}(\tau)b^+_{\mathbf{k}}(0)\right]\rangle$$



$$G_{2,2}(\mathbf{k},\tau) = -\langle T_\tau\left[b^+_{-\mathbf{k}}(\tau)b_{-\mathbf{k}}(0)\right]\rangle$$



A fenti függvényekben T_τ időrendező operátor: a nagyobb argumentumú kerül „balra”, azonos argumentum esetén pedig a keresztes kerül „balra”.

A Green függvények között az alábbi összefüggések érvényesek.

$$G_{2,1}(\mathbf{k},\tau) = G_{1,2}(-\mathbf{k},\ -\tau)$$

$$G_{1,1}(\mathbf{k},\tau) = G_{2,2}(-\mathbf{k},\tau)$$

Ezeket a függvényeket mátrixba foglalhatjuk:

$$G(\mathbf{k},\tau) = \begin{pmatrix} G_{1,1} & G_{1,2} \\ G_{2,1} & G_{2,2} \end{pmatrix}$$

Általános összefüggés, hogy

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},i\omega_n) = \int_0^{\beta\hbar} G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\tau)e^{i\omega_n\tau}d\tau$$

ahol $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta\hbar}$, mivel valamennyi $G_{\alpha,\beta}$ periodikus $\beta\hbar$ szerint a 2. argumentumában, illetve

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k},\tau) = \frac{1}{\beta\hbar}\sum_n G(\mathbf{k},i\omega_n)e^{-i\omega_n\tau}$$

A szabad Green-függvények:

$$G^{(0)}_{1,1}(\mathbf{k},i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}$$

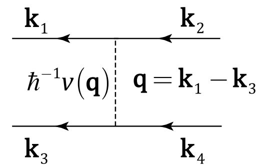
$$G^{0}_{2,2}(\mathbf{k},i\omega_n) = \frac{1}{-i\omega_n - \hbar^{-1}(e_k - \mu)}$$

$$G^{0}_{1,2}(\mathbf{k},i\omega_n) = 0 = G^{0}_{2,1}(\mathbf{k},i\omega_n)$$

Feynman-diagramok

Milyen Feynman-digramok fordulhatnak elő? A perturbáció most K_1' és $K_{I,i}$, $i \in \{1,...,4\}$ (Soktestprobléma I-ben csak a $K_{I,4}$ volt).

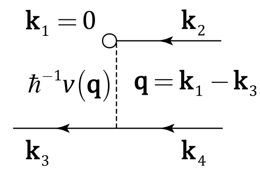
$$K_{I,4} = \frac{1}{2V} \cdot \sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} b^+_{\mathbf{k}_1} b^+_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} b_{\mathbf{k}_4} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)$$



(a tavalyiaknak megfelelően)

Az egyik tagja a $K_{I,3}$ -nak:

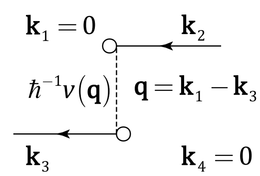
$$\frac{\sqrt{N_0}v(0)}{2V} \cdot \sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} b^+_{\mathbf{k}_1} b^+_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_4,0}$$



a kör egy $\sqrt{N_0}$ szorzót jelöl

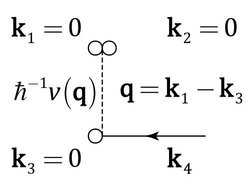
Az egyik tagja a $K_{I,2}$ -nek

$$\frac{N_0}{2V} \cdot \sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4 \\ \mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}} \delta_{\mathbf{k}_1,0} b^+_{\mathbf{k}_2} b_{\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_4,0} v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)$$

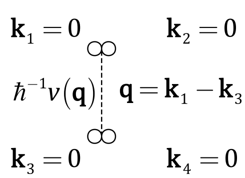


$K_{I,1}$ eltüntető részéhez tartozik

$$\frac{N_0^{3/2}}{2V} v(0) b_0$$



$$K_{I,0} = \frac{N_0^2}{2V} v(0)$$

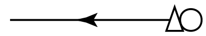


K_1' egyik tagja (az eltüntető operátorral)

$$(-\mu)\sqrt{N_0} b_0$$

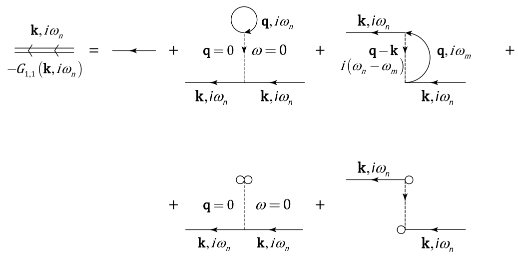
a háromszög a $-\mu$ -vel való szorzást jelöli

K_1' másik tagja (a keltő operátorral):

$(-\mu)\sqrt{N_0}b_0^+$ 

$K_0{}'$ 

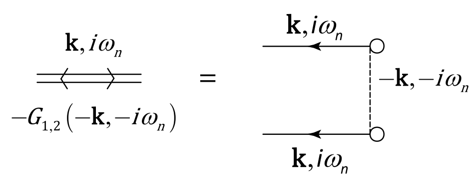
A kölcsönható rendszer Green-függvénye:



$$-G_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -G_{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + \left(-\hbar^{-1}\right) v(0)\left[-G_{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)\right]^2 \frac{1}{\beta\hbar}\sum_m \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}}\left[-G_{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)\right] e^{i\omega_n\eta} +$$

$$+\left(-\hbar^{-1}\right)\left[-G_{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)\right]^2 \frac{1}{\beta\hbar}\sum_m \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}-\mathbf{k})\left[-G_{(0)}(\mathbf{q}, i\omega_n)\right] e^{i\omega_n\eta} +$$

$$+\left(-\hbar^{-1}\right)\left[-G_{(0)}(k, i\omega_n)\right]^2 v(0)\frac{N_0}{V} + \left(-\hbar^{-1}\right)\left[G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)\right]^2 \frac{N_0}{V} v(-\mathbf{k})$$

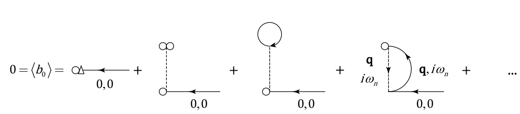


$$-G_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(-\hbar^{-1}\right)\left[-G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)\right]\left[-G_0(-\mathbf{k}, -i\omega_n)\right] \cdot \frac{N_0}{V} v(-\mathbf{k})$$

ebből láthatjuk, hogy az anomális Green-függvénynek nincs 0. rendje, azaz ha $v = 0 \Rightarrow G_{1,2} = 0$. $G_{1,2}$ akkor is eltűnik, ha nincs kölcsönhatás.

N_0 meghatározása

N_0 -t eddig paraméterként használtuk a $b_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}} - \sqrt{N_0}\delta_{\mathbf{k},0}$ egyenletben, ahol $\langle a_0^+ a_0\rangle \overset{Bogo.}{\approx} \langle a_0\rangle^2 = N_0$, így $\langle a_0\rangle = \sqrt{N_0} \Rightarrow \langle b_0\rangle = 0$. Most erre szeretnénk felírni perturbációs sort:



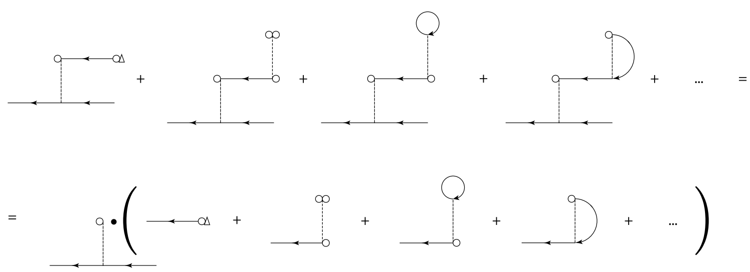
$$0=\left(-\hbar^{-1}\right)\left[\sqrt{N_0}(-\mu)+N_0^{3/2}v(0)+\frac{\sqrt{N_0}}{V}\sum_{\mathbf{q}}(v(0)+v(\mathbf{q}))\underbrace{\frac{-1}{\beta\hbar}\sum_m G_{(0)}(\mathbf{q},i\omega_n)}_{n'_{\mathbf{q}}=1/\left(e^{\beta(e_{\mathbf{q}}-\mu)}-1\right)}\right]$$

$$\mu=\frac{N_0}{V}v(0)+\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}}[v(0)+v(\mathbf{q})]n'_{\mathbf{q}}+...$$

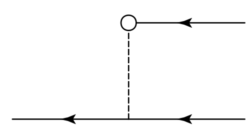
0 hőmérsékleten, ha n' elhanyagolható, ekkor a Bogoljubov kémiai potenciál: $\mu^{(B)}=n_0v(0)$, ahol $n_0=N_0/V$.

Megjegyzés

1: $\langle b_0\rangle=0$, $\langle b_0^+\rangle=0$, vagyis az összes olyan Feynman diagram összege, amibe csak 1 vonal fut be, 0.



Az ábráról látható következmény, hogy sose kell 3 keltő vagy eltüntető operátort tartalmazó diagramot számolni, mert azok összege 0. (Kiemelve azokból azt a részt, amibe csak 1 vonal fut be, azok összege 0.) Azaz az alábbi diagramokat nem kell számolni:



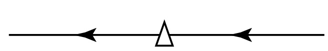
2: ha $v(0)>0$, ekkor $\mu>0$, azaz $\mu=n_0v(0)+...$

$$G_{(0)}(\mathbf{k},i\omega_n)=\frac{1}{i\omega_n-\hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}}-\mu)}\Rightarrow n'_{\mathbf{k}}=\frac{-1}{\beta\hbar}\sum_m G_{(0)}(\mathbf{k},i\omega_n)e^{i\omega_n\eta}=\frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}}-\mu)}-1}$$

és ha ebbe behelyettesítjük a pozitív kémiai potenciált, akkor $n'_{\mathbf{k}}$ negatív értéket is felvehet, és a szabad Green-függvény pedig divergál, és ez a kezelhetetlenné teszi a szabad Green-függvényt.

$$K_0=\sum_{\mathbf{k}}(e_{\mathbf{k}}-\mu)b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}}=\underbrace{\sum_{\mathbf{k}}(e_{\mathbf{k}}-\mu_0)b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}}}_{K_0'}+\underbrace{\sum_{\mathbf{k}}(\mu_0-\mu)b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}}}_{K_2'}$$

Utóbbi tag diagramja:



vagyis μ -t perturbációnak vesszük. Így a szabad Green-függvényünk:

$$G_{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} \dfrac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}\, e_{\mathbf{k}}} & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{-i\omega_n - \hbar^{-1}\, e_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}$$

Dyson-Beljajev (Beliaiev) egyenlet

$$G_{\alpha,\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_{(0);\,\alpha,\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{(0);\,\alpha,\gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n)\Sigma_{\gamma,\delta}(\mathbf{k}, i\omega_n)G_{\delta,\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n)$$

mátrixos írásmódban ugyanezt kiírva:

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) + \mathbf{G}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n)\mathbf{\Sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)\mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$$

melyből szeretnénk $G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ -t kifejezni. A kifejezéshez invertálni kell egy 2×2-es mátrixot, ami nem akadály:

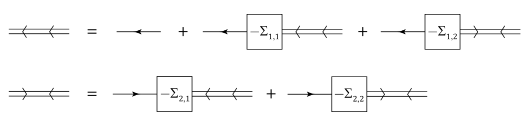
$$G_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \hbar^{-1}\, e_{\mathbf{k}} + \Sigma_{2,2}(\mathbf{k}, i\omega_n)}{D(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

$$G_{2,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-\Sigma_{2,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)}{D(\mathbf{k}, i\omega_n)}$$

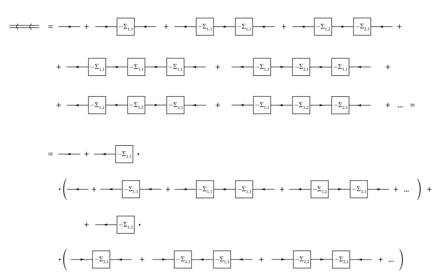
ahol $D(\mathbf{k}, i\omega_n)$ a determináns:

$$D(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[i\omega_n - \hbar^{-1}\, e_{\mathbf{k}} - \Sigma_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)\right]\left[i\omega_n + \hbar^{-1}\, e_{\mathbf{k}} + \Sigma_{2,2}(\mathbf{k}, i\omega_n)\right] + \Sigma_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n)\Sigma_{2,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)$$

Grafikusan szemléltetve a következőt láthatjuk:



A felső sor, $G_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ -hoz tartozó eredmény grafikus bizonygatása:

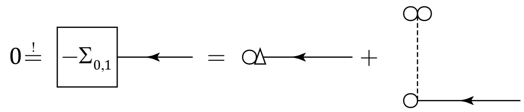


Vegyük ugyanis észre a zárójelezésben a Green-függvényeket! Behelyettesítve őket adódik az eredmény.

Bogoljubov-közelítés

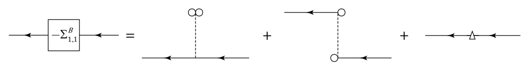
Kémiai potenciál és n_0 kapcsolata

$-\Sigma_{0,1}^{B}$ annak a sajátenergiája, amibe csak 1 vonal fut be:

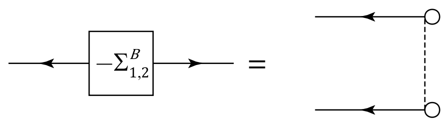


vagy is $-\mu^B + v(0)n_0 = 0 \Leftrightarrow \mu^B = n_0 v(0)$

$\Sigma^B_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \hbar^{-1}\, n_0 v(\mathbf{k})$



$\Sigma^B_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \hbar^{-1}\, n_0 v(\mathbf{k})$



$\Sigma^B_{2,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma^B_{1,1}(-\mathbf{k}, -i\omega_n)$

$\Sigma^B_{2,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma^B_{1,2}(-\mathbf{k}, -i\omega_n)$

$D^{(B)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right]\left[i\omega_n + \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right] + \left(\hbar^{-1}\, n_0 v(\mathbf{k})\right)^2$

$G^{(B)}_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n\, \hbar^{-1}(e_k + n_0 v(\mathbf{k}))}{D^{(B)}(\mathbf{k}, i\omega_n)}$

$G^{(B)}_{2,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-\hbar^{-1}\, n_0 v(\mathbf{k})}{D^{(B)}(\mathbf{k}, i\omega_n)}$

Terjesszük ki a Green-függvényt a komplex félsíkon, hogy megkapjuk a gerjesztéseket! $i\omega_n \to \omega + i\varepsilon$ Hol divergál $G^{(B)}_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ függvény? Ahol a nevezője 0. Ezek adják meg az elemi gerjesztéseket. Ezeknek a frekvenciái, vagyis ahol $D^{(B)}(\mathbf{k}, i\omega_n)\big|_{\omega=\hbar E_\mathbf{k}} = 0$:

$$0 = E_\mathbf{k}^2 - \hbar^{-2}(e_\mathbf{k} + n_0 v(\mathbf{k}))^2 + \hbar^{-2}\, n_0^2 v^2(\mathbf{k})$$

ebből kifejezhető:

$$\hbar E_\mathbf{k} = \sqrt{e_\mathbf{k}(e_\mathbf{k} + 2n_0 v(\mathbf{k}))}$$

mely kicsi $\mathbf{k}$ értékekre: $E_\mathbf{k} \approx \hbar\, c \cdot k$, ahol $e_\mathbf{k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ összefüggést helyettesítettünk be és $c = \sqrt{\frac{n_0 v(0)}{m}}$ a Bogoljubov hangsebesség.

$D(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(i\omega_n - \hbar^{-1} E_k\right)\left(i\omega_n + \hbar^{-1} E_k\right)$, így $G^{(B)}_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ parciális törtek alakjában felírva:

$$G^{(B)}_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{u_k^2}{i\omega_n - \hbar^{-1} E_\mathbf{k}} - \frac{v_k^2}{i\omega_n + \hbar^{-1} E_\mathbf{k}}$$

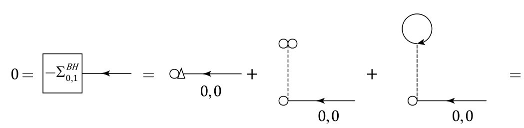
ahol $u_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{e_\mathbf{k} + n_0 v(\mathbf{k})}{E_\mathbf{k}}\right]$ és $v_k^2 = \frac{1}{2}\left[-1 + \frac{e_\mathbf{k} + n_0 v(\mathbf{k})}{E_\mathbf{k}}\right]$. Az anomális Green-függvény pedig:

$$G^{(B)}_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -u_k v_k \cdot \left(\frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1} E_\mathbf{k}} - \frac{1}{i\omega_n + \hbar^{-1} E_\mathbf{k}}\right)$$

Bogoljubov-Hartree közelítés

A közelítés során csak a Hartree tagot vesszük figyelembe. Ez a legegyszerűbb közelítés a Bogoljubov közelítésen túl.

1. kondenzátum részecskeszám (sűrűség) és kémiai potenciál kapcsolata



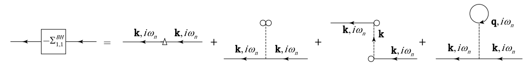
$$= \hbar^{-1}\sqrt{N_0}\left[-\mu + v(0)n_0 + v(0)\frac{1}{\beta\hbar}\sum_m \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}(-G_0(\mathbf{q}, i\omega_n))\right] \cdot -G_0(0{,}0)$$

Ekkor $\mu = v(0) \cdot (n_0 + n') = v(0) \cdot n$. Fontos, hogy itt $v(0)$ -at már a teljes részecskeszám-sűrűséggel szorozzuk. A kondenzátumon kívüli részecskeszám sűrűsége:

$$n' = N'/V = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{1}{e^{\beta e_\mathbf{q}} - 1} = \frac{1}{(2\pi)^3\lambda^3}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)F\left(\frac{3}{2},0\right)$$

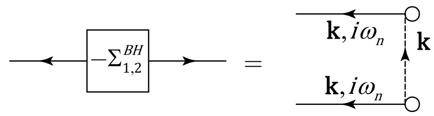
ahol $F(s,\gamma) = \frac{1}{\Gamma(s)} \cdot \int\limits_0^\infty dt\,\frac{t^{s-1}}{e^{t+\gamma} - 1} = Li_s(e^{-\gamma})$, ahol Li_s az ún. polilogaritmikus függvény, $\Gamma(s) = \int\limits_0^\infty e^{-t}t^{s-1}dt$, és $\lambda = \frac{\hbar^2}{2mk_BT}$, valamint $F(s,0) = \zeta(s)$. $n' = n \cdot (T/T_c)^{3/2}$ és $n_0 = n - n' = n\left[1 - (T/T_c)^{3/2}\right]$ és $n = n'(T_c)$, mint ahogy azt már megszokhattuk.

2. sajátenergiák



$$\hbar\,\Sigma_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = (-\mu) + v(0)n_0 + v(\mathbf{k})n_0 + v(0)n'$$

az anomális sajátenergia pedig:



$$\hbar\,\Sigma_{1,2} = v(\mathbf{k}) \cdot n_0$$

Vegyük észre, hogy $\hbar\,\Sigma_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ 1, 2. és 4. tagjának összege 0, így

$$\hbar\,\Sigma_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = v(\mathbf{k}) \cdot n_0$$

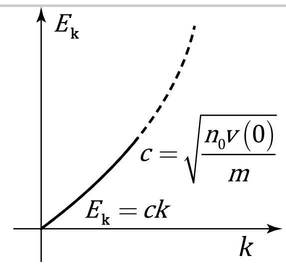
3. A Green-függvények

$$G^{(B-H)}_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{u_k^2}{i\omega_n - \hbar^{-1}E_\mathbf{k}} - \frac{v_k^2}{i\omega_n + \hbar^{-1}E_\mathbf{k}}$$

és

$$G^{(B-H)}_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -u_k v_k \cdot \left(\frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1}E_\mathbf{k}} - \frac{1}{i\omega_n + \hbar^{-1}E_\mathbf{k}}\right)$$

ahol $E_\mathbf{k} = \sqrt{e_\mathbf{k}(e_\mathbf{k} + 2n_0 v(\mathbf{k}))}$, valamint $u_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{e_\mathbf{k} + n_0 v(\mathbf{k})}{E_\mathbf{k}}\right]$ és $v_k^2 = \frac{1}{2}\left[-1 + \frac{e_\mathbf{k} + n_0 v(\mathbf{k})}{E_\mathbf{k}}\right]$. Vagyis láthatjuk, hogy formálisan ugyanazt kapjuk, mint a Bogoljubov közelítésnél. A különbség az, hogy $n_0(T) = n\left(1 - (T/T_c)^{3/2}\right)$ hőmérséklet-függő. Ez akkor a Bogoljubov közelítés, ha $T = 0$. Ebben a közelítésben $c \to 0$ ha $T \to T_c$.



Diszperziós reláció a Bogoljubov-Hartree közelítésben

Kondenzátumon kívüli atomok száma

A teljes propagátorból számolva $n' = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n'(k)$, melyben

$$n'(k) = \frac{-1}{\beta\hbar}\sum_m e^{i\nu_m\eta} \cdot G_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-1}{\beta\hbar}\sum_m e^{i\nu_m\eta} \cdot \left[\frac{u_k^2}{i\omega_n - \hbar^{-1}E_\mathbf{k}} - \frac{v_k^2}{i\omega_n + \hbar^{-1}E_\mathbf{k}}\right]$$

Végezzük el a frekvencia szerinti integrálást!

$$n'(k) = \frac{u_k^2}{e^{\beta E_\mathbf{k}} - 1} - \frac{v_k^2}{e^{-\beta E_\mathbf{k}} - 1} = \frac{u_k^2 + e^{\beta E_\mathbf{k}} \cdot v_k^2}{e^{\beta E_\mathbf{k}} - 1} = v_k^2 + \left(u_k^2 + v_k^2\right) \cdot \frac{1}{e^{\beta E_k} - 1}$$

Ezt visszaírva n' -be, az már csak az integrálást kell elvégezni. Ez nem mindig tehető meg analitikusan, csak speciális esetekben. Pl

a. $T = 0$ esetén (Bogo. közelítés): $n'(k) = v_k^2 \Rightarrow n'|_{T=0} = \frac{8}{3} n_0 \left(\frac{n_0 a^3}{\pi}\right)^{1/2}$

b. $T = T_c$ esetén (szabad, nem kondenzált gáz):

$$\left.\begin{aligned} E_\mathbf{k} &= e_\mathbf{k} \\ v_k^2 &= 0 \\ u_k^2 &= 1 \end{aligned}\right\} \Rightarrow n'(k) = n(k)$$

c. $T \to 0$, de $T \neq 0$ esetén: $n'|_T - n'|_{T=0} = \frac{1}{12}\frac{m}{c\hbar^3}(k_B T)^2$, ahol c a Bogoljubov hangsebesség, $c^2 = nv(0)/m$

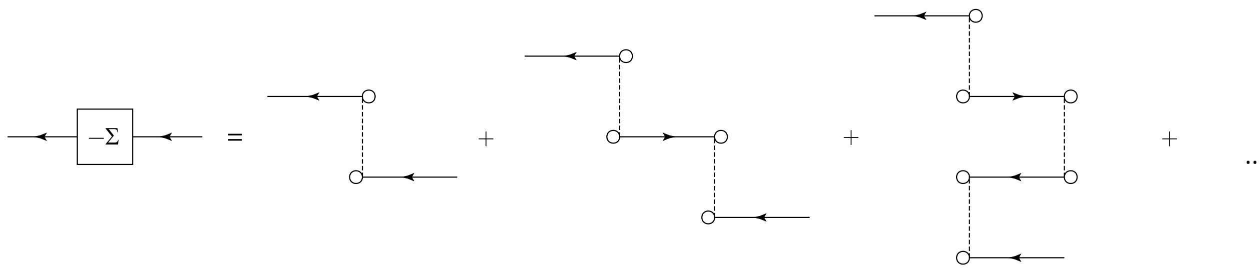
Érdekesség

Bogoljubov közelítésben nézzük meg, hogy a

$$G_{1,1}^{(B)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 \cdot v(\mathbf{k}))}{\left[i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right] \cdot \left[i\omega_n + \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right] + \hbar^{-2} n_0^2 v(\mathbf{k})^2}$$

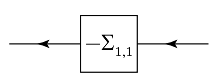
Green-függvény felírható-e $G_{1,1}^{B}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \hbar^{-1} e_{\mathbf{k}} - \Sigma^*(\mathbf{k}, i\omega_n)}$ alakban, azaz létezik-e ilyen Σ^* ? A válasz az, hogy igen, és mégpedig:

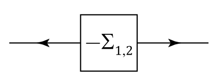
$$\Sigma^*(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\hbar^{-1} n_0 v(\mathbf{k})}{1 - \frac{\hbar^{-1} n_0 \cdot v(\mathbf{k})}{-i\omega_n - \hbar^{-1} e_{\mathbf{k}}}}$$



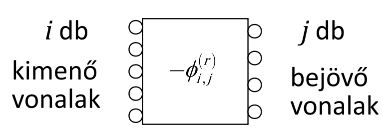
Hugenholtz-Pines tétel

$\Sigma_{1,1}(0,0) - \Sigma_{1,2}(0,0) = 0$ igaz a perturbációszámítás minden rendjében. Láthatjuk néha $\Sigma_{1,1}(0,0) - \Sigma_{1,2}(0,0) = \mu$ alakban is, de mi a kémiai potenciált a normális sajátenergia részeként kezeljük. A bizonyításhoz tekintsük az ábrákat! A normális sajátenergia diagramja 1 ki- és 1 bejövő, az anomális sajátenergia diagramja pedig 2 kimenő élt tartalmaz:





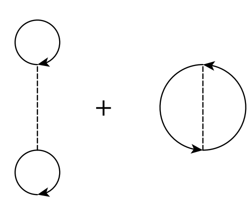
Most pedig tekintsünk egy r-ed rendű diagramot, mely nem csatlakozik külső pontohoz, mert az éleket karikákra cseréltük:

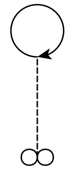
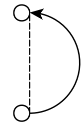


$$\Sigma_{1,1}^{(r)}(0,0) = \frac{1}{N_0} \sum_{i,j} i \cdot j \cdot \phi_{i,j}^{(r)}$$

Mik lehetnek ezek a $\phi_{i,j}^{(r)}$ diagramok? Nézzünk 2 példát!

$\phi_{0,0}^{(1)} =$

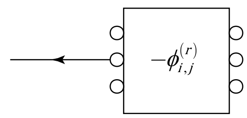


$\phi_{1,1}^{(1)} =$  $+$ 

$$\Sigma_{1,1}^{(r)}(0,0) - \Sigma_{1,2}^{(r)}(0,0) = \frac{1}{N_0}\sum_{i,j}(i \cdot j - i(i-1))\phi_{i,j}^{(r)} = \frac{1}{N_0}\sum_{i}\left(i^2 - i^2 + i\right)\phi_{i,j}^{(r)} = \frac{1}{N_0}\sum_{i} i\phi_{i,i}^{(r)} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N_0}}\frac{1}{\sqrt{N_0}}\sum_{i} i\phi_{1,1}^{(r)} = \frac{1}{\sqrt{N_0}}\Sigma_{1,0}^{(r)}(0,0) = 0$$

Az egyenlőség második sorában a bal oldalt az alábbi diagram ábrázolja:



$= -\Sigma_{1,0}^{(r)}(0,0)$

Gap nélküli gerjesztés: $E_{\mathbf{k}\to 0} \to 0$, azaz $E_{\mathbf{k}}$ a 0-ból indul $\Rightarrow D(0,0) = 0$. Behelyettesítve

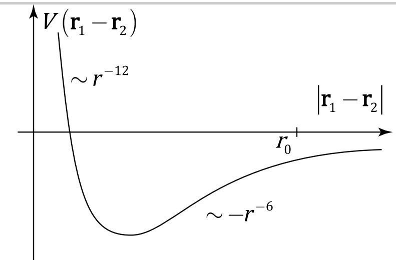
$D(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left[i\omega_n - \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right]\left[i\omega_n + \hbar^{-1}(e_{\mathbf{k}} + n_0 v(\mathbf{k}))\right] + \left(\hbar^{-1} n_0 v(\mathbf{k})\right)^2$ egyenletbe,

$$D(0,0) = -\Sigma_{1,1}(0,0)\Sigma_{2,2}(0,0) + \Sigma_{1,2}(0,0)\Sigma_{2,2}(0,0) = -\Sigma_{1,1}^2(0,0) + \Sigma_{1,2}^2(0,0) =$$

$$= -\left[\Sigma_{1,1}(0,0) - \Sigma_{1,2}(0,0)\right] \cdot \left[\Sigma_{1,1}(0,0) + \Sigma_{1,2}(0,0)\right]$$

ahol felhasználtuk, hogy $\Sigma_{1,1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma_{2,2}(-\mathbf{k}, -i\omega_n)$, illetve $\Sigma_{1,2}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma_{2,1}(-\mathbf{k}, i\omega_n)$.

Kétrészecske kölcsönhatás vákuumban



Kétrészecske potenciál általános alakja
Lennard-Jones-potenciál közelítésben r_0 hatótávval

Két részecskénk van csak egyelőre, 2 bozon vagy fermion. A Hamilton-operátor:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + v(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

Ekkor a Schrödinger egyenlet

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

Bevezethetünk új térkoordinátákat, a tömegközéppontit és a relítvat:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

És új impulzusokat:

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{2}$$

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2}{2}$$

Ekkor ψ térfüggése felírható szorzatalakban:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{R}}$$

A Hamilton operátor az új koordinátákkal, bevezetve az össztömeg $M = m + m$ és redukált tömeg $\mu = \frac{m+m}{m \cdot m}$ kifejezéseit (különböző tömegű részecskék esetén m-ek értelemszerű indexelésével):

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + v(\mathbf{r})$$

Így a Schrödinger-egyenlet:

$$\left[\frac{-\hbar^2\, \Delta_{\mathbf{r}}}{2M} + \frac{\hbar^2\, K^2}{2M} + v(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Ekkor bevezetve a $k^2 = \frac{m}{\hbar^2} E - \frac{K^2}{4}$ és $V(\mathbf{r}) = \frac{m}{\hbar^2}\, v(\mathbf{r})$ mennyiségeket, a Schrödinger egyenlet a következő alakban írható:

$$\left(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2\right)\psi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

Definiáljuk a Schrödinger egyenlet Green-függvényét:

$$\left(\Delta_{\mathbf{r}} + k^2\right) G_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

A Schrödinger egyenlet megoldásai:

- Kölcsönhatás-mentes esetben, azaz ha $V = 0$, az egyik megoldás:
$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{r}}$$
- kölcsönható (általános) esetben az egyik megoldás:
$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \lambda \cdot e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{r}} - \int G_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') d^3 r'$$

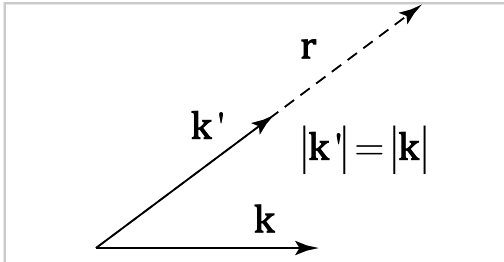
  Ennek megoldását már más tárgyakból is tanultuk:

$$G_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{q^2-k^2-i\eta} = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

Ha $r \gg r_0$, $G_{\mathbf{k}}^{(+)}$ sorbafejthető, mert

$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r|\mathbf{e_r}-\mathbf{r}'/r| \approx r - \mathbf{r}\,\mathbf{r}'/r + O(r_0/r)$, így :

$G_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}e^{-\frac{ik\mathbf{r}\,\mathbf{r}'}{r}}$.



A hullámszámvektor és hely koordináta

Ekkor a megoldás:

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\,\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} \cdot V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')d^3r'$$

Definiálhatjuk a szórási amplitúdót:

$$f^{(+)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') := -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')d^3r'$$

Megjegyzés: ott, ahol $V(\mathbf{r})$ divergál, ott $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ eltűnik, viszont $f^{(+)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ véges marad. Perturbatív kezelés nem lehetséges, mert véges rendben nem lehet levinni ψ -t 0-ba.

Fourier-transzformáljuk a potenciált és a hulláfüggvényt:

$$V(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\,\mathbf{r}} \cdot V(\mathbf{r})d^3r$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\,\mathbf{r}}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^3\delta(\mathbf{q}-\mathbf{k}) - \frac{1}{q^2-k^2-i\eta}\int V(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}-\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi)^3}$$

Ekkor a szórási amplitúdók kifejezhetőek ezekkel a mennyiségekkel:

$$\widetilde{f^{(+)}}(\mathbf{k},\mathbf{k}') := -4\pi f^{(+)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \int V(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}'-\mathbf{p})\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \int V(\mathbf{k}'-\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})\frac{d^3P}{(2\pi)^3}$$

$$\widetilde{f^{(+)}}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\int\frac{V(\mathbf{k}'-\mathbf{p})\widetilde{f^{(+)}}(\mathbf{k},\mathbf{p})}{k^2-p^2+i\eta}\frac{d^3p}{(2\pi)^3}$$

(2)

Megjegyzés:

- $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ -t megkapjuk nem csak a tömeghéjon
- erős taszító potenciálban megoldva minden rend divergens
- Born-közelítés: $\widetilde{f^{(+)}}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$
- Parciális hullámok módszere:

$$f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi}\widetilde{f}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{k}\sin(\delta_l)P_l(\cos\vartheta)$$

  $\delta_0 = -ka$ (s-hullámú szórási hossz), $\delta_l = |ka|^{2l+1}$ Ga $|k\cdot a| \ll 1$, akkor elég csak az s-hullámot figyelembe venni: $\Rightarrow f(\mathbf{k},\mathbf{k}') = -a(1+O(k\cdot a))$, így

$$\widetilde{f} = 4\pi a \Rightarrow V(k) = 4\pi a \Rightarrow v(k) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$$

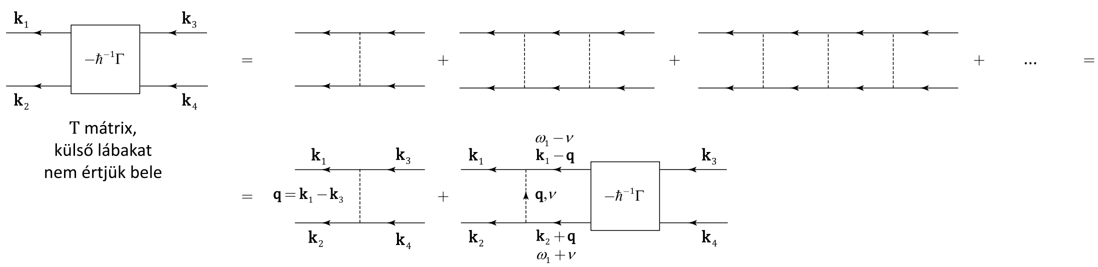
- Merev gömbű, r_0 sugarú potenciálra a szórási hossz, ha csak az s hullámú szórási hossz vesszük figyelembe, épp $2\cdot r_0$

Kétrészecske szórás közegben

Definiáljuk a négypontfüggvényt, vagy más néven T-mátrixot:

$$\Gamma(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4)=v(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)-\int\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_m v(\mathbf{q})G_{(0)}(\mathbf{k}_1-\mathbf{q})G_{(0)}(\mathbf{k}_2+\mathbf{q})\Gamma(\mathbf{k}_1-\mathbf{q},\mathbf{k}_2+\mathbf{q},\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

A T-mátrix diagramja:



Állítás: Γ nem függ az átadott frekvenciától. Ezért a Matsubara-frekvenciákra való összegzés elvégezhető.

$$\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_m G_{(0)}(\mathbf{k}_1-\mathbf{q})G_{(0)}(\mathbf{k}_2+\mathbf{q})=\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_m\frac{1}{i\omega_1-i\nu_m-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}-\mu\right)}\cdot\frac{1}{i\omega_2+i\omega_m-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\mu\right)}=$$

$$=\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_m\frac{1}{i\omega_1+i\omega_2-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}+e_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}-2\mu\right)}\left[\frac{1}{i\omega_1-i\nu_m-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}-\mu\right)}+\frac{1}{i\omega_2+i\nu_m-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}-\mu\right)}\right]=$$

$$=-\frac{1}{\hbar}\frac{1+n^{(0)}(\mathbf{k}_1-\mathbf{q})+n^{(0)}(\mathbf{k}_2+\mathbf{q})}{i\omega_{n_1}+i\omega_{n_2}-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}+e_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}-2\mu\right)}$$

ahol $n^{(0)}(\mathbf{k})=\frac{1}{e^{\beta(e_{\mathbf{k}}-\mu)}-1}$.

Tömegközépponti és relatív koordinátákkal:

$$\mathbf{K}=\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2=\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4$$

$$\mathbf{k}=\frac{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}{2}$$

$$\mathbf{k}'=\frac{\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4}{2}$$

Ekkor

$$i\omega_N=i\omega_{n_1}+i\omega_{n_2}=i\omega_{n_3}+i\omega_{n_4}$$

$$z-2\left(e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\mu\right):=\hbar\left(i\omega_{n_1}+i\omega_{n_2}-\hbar^{-1}\left(e_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}+e_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}}-2\mu\right)\right)=i\hbar\,\omega_N-\frac{\hbar^2K^2}{4m}$$

illetve

$$\Gamma(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4)\to\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)$$

Ekkor az jön ki, hogy

$$\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=v(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+\int v(\mathbf{q})\frac{F_{(+)}(\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{q})}{z-2\left(e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\mu\right)}\Gamma(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

(3) melyben

$$F_{(+)}(\mathbf{K},\mathbf{k}-\mathbf{q}) = 1 + n^{(0)}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) + n^{(0)}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) = 1 + n^{(0)}(\mathbf{K}/2 + \mathbf{k} - \mathbf{q}) + n^{(0)}(\mathbf{K}/2 - \mathbf{k} + \mathbf{q})$$

A T-mátrix és a szórási amplitúdó kapcsolata

Vezessünk be egy hullámfüggvényt a közegbeli szórásra, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})$ -val analóg mennyiséget a közegre, ez legyen

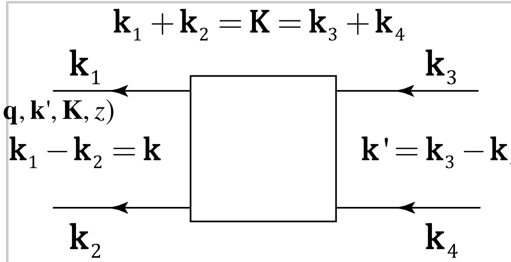
$$\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)$$

$$\chi(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+\frac{F_{(+)}(\mathbf{K},\mathbf{k})}{z-2(e_{\mathbf{k}}-\mu)}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)$$

1. $T=0$ esete, ekkor $F_{(+)}(\mathbf{K},\mathbf{k})=1$ .Ekkor χ az alábbi egyenletnek tesz eleget:

$$\chi_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+\frac{1}{z-2(e_{\mathbf{k}}-\mu)}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z) \quad (4)$$

$$\Gamma_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)$$



$T=0$ esetén a diagram

Az (5)-ös egyenletből:

$$z-2(e_{\mathbf{k}}-\mu)\chi_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)-\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)=(2\pi)^3[z-2(e_{\mathbf{k}}-\mu)]\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1) \quad (5a)$$

$$\left(2e_{\mathbf{k}_1}-2e_{\mathbf{k}}+i\eta\right)\psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})-\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}-\mathbf{q})=(2\pi)^3\left[2e_{\mathbf{k}_1}-2e_{\mathbf{k}}+i\eta\right]\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

ez abból jött, hogy még előző órán

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})=(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{q})-\frac{1}{q^2-k^2-i\eta}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,V(\mathbf{p})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}-\mathbf{p})$$

Ha most $\mathbf{k}\neq\mathbf{k}_1$, akkor $\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})$ -vel szorozva (5a)-t, majd $\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ -val kiintegrálva kapjuk az (5b) egyenletet:

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}[z-2(e_{\mathbf{k}}-\mu)]\chi_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})-\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})=$$

$$=[z-2(e_{\mathbf{k}'}-\mu)]\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}') \quad (5b)$$

A bal oldal második tagjában térjünk át $\mathbf{k}''=\mathbf{k}-\mathbf{q}$ szerinti integrálásra, ekkor

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\chi_0(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})=-\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\,\chi_0(\mathbf{k}'',\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\cdot\underbrace{\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,v(\mathbf{q})\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}''+\mathbf{q})}_{\left[2e_{\mathbf{k}_1}-2e_{\mathbf{k}''}-i\eta\right]\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}'')}$$

ahol a kapcsos kifejezéshez elvégeztünk egy $\mathbf{q}\to-\mathbf{q}$ trafót. Mivel v szimmetrikus, így az marad maga. Ekkor az (5b) egyenlet:

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[z-2\left(e_{\mathbf{k}_1}-\mu\right)+i\eta\right]\chi_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})=[z-2(e_{\mathbf{k}'}-\mu)]\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}')$$

$$\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\chi_0(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})=(z-2e_{\mathbf{k}'}+2\mu)\frac{\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}')}{z-2e_{\mathbf{k}_1}+2\mu}$$

ahol $\eta\to 0$ határátmenetet elvégeztük, azaz $\eta=0$ -t behelyettesítettünk (z úgyis tartalmaz még egy képzetes részt a Matsubara-frekvencia miatt). Használjuk fel a

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, \psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}_1)\psi^*_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}_2) = (2\pi)^3 \cdot \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$$

összefüggést, azaz integráljuk mindkét oldalt $\int \psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}") \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3}$ szerint:

$$\chi_0(\mathbf{k}", \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = (z - 2e_{\mathbf{k}'} + 2\mu) \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \frac{\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}')\psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k})}{z - 2e_{\mathbf{k}_1} + 2\mu}$$

Ne felejtsük, hogy $\psi^*_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}') = (2\pi)^3\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_1) + \frac{\widetilde{f}^*(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}')}{2e_{\mathbf{k}_1} - 2e_{\mathbf{k}'} - i\eta}$ ezt beírva és elvégezve az integrálást, majd parciális törtekre való bontást:

$$\chi_0(\mathbf{k}", \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{k}") + \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2e_{\mathbf{k}_1} - 2e_{\mathbf{k}'} - i\eta} + \frac{1}{z - 2e_{\mathbf{k}} + 2\mu}\right] \psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{k}") \cdot \widetilde{f}^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{k})$$

Mindkét oldalt $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}")$ szerint integrálva:

$$\Gamma_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = \widetilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2e_{\mathbf{q}} - 2e_{\mathbf{k}'} - i\eta} + \frac{1}{z - 2e_{\mathbf{q}} + 2\mu}\right] \widetilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \cdot \widetilde{f}^*(\mathbf{k}', \mathbf{q})$$

2. $T > 0$ esetén a (4)-es egyenlet mindkét oldaláról levonunk $\frac{\Gamma(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},z)}{z - 2e_{\mathbf{k}} + 2\mu}$-t, majd beírjuk Γ definícióját:

$$\chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) - \frac{1}{z - 2e_k + 2\mu} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q})\chi(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) =$$

$$= (2\pi)^3\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{F_{(+)}(\mathbf{K}, \mathbf{k}) - 1}{z - 2(e_{\mathbf{k}} - \mu)} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z)$$

ekkor χ -t felírva, mint

$$\chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = \int \frac{d^3q}{2\pi^3} (2\pi)^3\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \chi(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z)$$

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left[(2\pi)^3\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \frac{v(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{z - 2e_{\mathbf{k}} + 2\mu}\right] \chi(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) =$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[(2\pi)^3\delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{v(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{z - 2e_{\mathbf{k}} + 2\mu}\right] \chi_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}", \mathbf{K}, z) =$$

$$= (2\pi)^3\delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}")$$

Integrálva mindkét oldalt $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \chi_0(\mathbf{k}", \mathbf{k}, \mathbf{K}, z)$ szerint:

$$\chi(\mathbf{k}", \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = \chi_0(\mathbf{k}", \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \chi_0(\mathbf{k}", \mathbf{k}, \mathbf{K}, z) \frac{F_{(+)}(\mathbf{K}, \mathbf{k}) - 1}{z - 2(e_{\mathbf{k}} - \mu)} \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z)$$

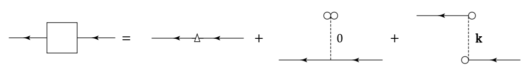
Most integrálva $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}")$ szerint:

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) = \Gamma_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \Gamma_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{K}, z) \frac{F_{(+)}(\mathbf{K}, \mathbf{k}) - 1}{z - 2(e_{\mathbf{q}} - \mu)} \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z)$$

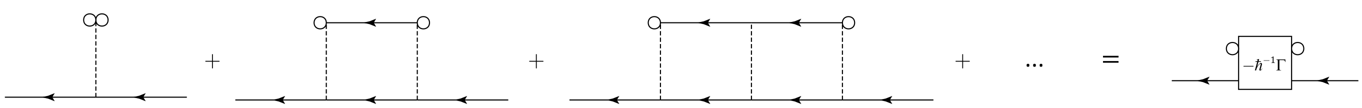
Alacsony energiás szórásnál, azaz ha $|\mathbf{k}a| \ll 1$:

$$\widetilde{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}[1 + O(|\mathbf{k}a|)] \Rightarrow \Gamma_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) \approx \Gamma_0(0{,}0{,}0{,}0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \Rightarrow \Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{K}, z) \approx \Gamma(0{,}0{,}0{,}0) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$$

$v(\mathbf{k}) \leftarrow \Gamma(0{,}0{,}0{,}0) = 4\pi\hbar^2 a/m$, $v(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta(\mathbf{r})$



Az utolsó tagját a diagramnak lecseréljük a következőre:

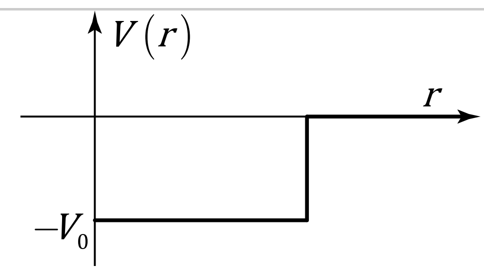


Azt szoktuk mondani, hogy $a > 0$ esetén egy kölcsönhatás taszító, $a < 0$ esetén viszont vonzó. Ez a hétköznapi képünknek nem teljesen fog megfelelni. Ennek árnyalásához tekintsük a következőket.

Alakrezonancia

A Schrödinger egyenlet ekkor:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + V(r)\chi(r) = E \cdot \chi(r)$$



Ez már egy igen egyszerű potenciál, erre a S. egyenletet is meg tudjuk oldani.

ahol $\chi(r) = r \cdot R(r)$ alakú. Szeretnénk majd az alacsony energiás szórásokat tekinteni. De előtte: vegyük az $E < 0$ esetet. Ekkor a megoldás $r < r_0$ tartományban $\chi(r) = \sin(q \cdot r)$, illetve az $r > r_0$ tartományon: $\chi(r) = e^{-\kappa r}$ (a hullámfüggvényt később, ha akarjuk – de nem fogjuk – normálhatjuk). χ és a deriváltja a határon menjen át simán, azaz

$$\left.\frac{\chi'(r)}{\chi(r)}\right|_{r<r_0} = q\,\mathrm{ctg}(qr) = -\kappa$$

.

Ha ennek van megoldása, akkor létezik kötött állapot.

$$\hbar q = \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

$$\hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}$$

$$q \cdot \mathrm{ctg}(qr_0) < 0$$

$$E_B := -E$$

. Épp akkor jelenik meg a kötött állapot, amikor

$$q^* \cdot \mathrm{ctg}(q^* r) = 0$$

$$E_B = 0$$

$$\operatorname{ctg} q^* r_0 = 0$$

$$q^* r_0 = \frac{\pi}{2}$$

$$q^{*2} r_0^2 = \pi^2/4$$

$$\frac{2mV_0^* r_0^2}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4}$$

így végül

$$V_0^* = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mr_0^2}$$

Ha $V_0 \geq V_0^*$, akkor van kötött állapot.

Ha $V_0 < V_0^*$, akkor nincs kötött állapot.